



Problème à N corps nucléaire et force effective dans les méthodes de champ moyen auto-cohérent

Thomas Duguet

► To cite this version:

Thomas Duguet. Problème à N corps nucléaire et force effective dans les méthodes de champ moyen auto-cohérent. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2002. Français. NNT: . tel-00001784

HAL Id: tel-00001784

<https://theses.hal.science/tel-00001784>

Submitted on 7 Oct 2002

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITE PARIS 6

Spécialité

Physique Nucléaire Théorique

présentée par

Thomas DUGUET

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR de l'UNIVERSITE PARIS 6

Problème à N corps nucléaire et force effective dans les
méthodes du champ moyen auto-cohérent.

devant le jury composé de :

M. Pierre BILLOIR	Président
M. Jean-François BERGER	Rapporteur
M. Paul-Henri HEENEN	Rapporteur
M. Georges BERTSCH	Examineur
M. Philippe CHOMAZ	Examineur
M. Jacek DOBACZEWSKI	Examineur
M. Paul BONCHE	Directeur de thèse

Résumé

Le travail présenté porte sur deux aspects des méthodes microscopiques variationnelles utilisées dans les calculs de structure nucléaire à basse énergie.

La première étude se situe à l'approximation du champ moyen où la formalisation du lien entre la fonction d'onde d'un noyau pair-pair et celle du voisin pair-impair est revisitée. Afin d'en obtenir une description cohérente quelle que soit l'intensité de l'appariement dans le système, l'utilité de la formalisation de ce lien selon un processus en deux étapes est démontrée. La séparation des étapes autorise l'extraction d'effets associés à différents canaux de la force lors de l'ajout d'un nucléon dans la fonction d'onde du système. En particulier, des formules perturbatives évaluant la contribution des termes de la fonctionnelle impairs sous renversement du temps à l'énergie de séparation d'un nucléon en présence et en l'absence d'appariement sont dérivées. Des calculs auto-cohérents valident ensuite le schéma théorique ainsi que les formules d'approximation d'un point de vue quantitatif. Cette première étude se termine par une analyse approfondie de l'oscillation pair/impair des masses dans les noyaux. Le schéma développé permet à nouveau d'identifier la contribution de chacun des canaux de la force à cette observable. La nécessité d'une meilleure connaissance des termes impairs de la fonctionnelle de l'énergie pour conclure quant à la formule de différence de masses la plus apte à isoler le gap d'appariement au niveau de Fermi est identifiée. Ces termes n'étant pas sous contrôle aujourd'hui, c'est au prix d'un travail significatif sur ceux-ci qu'un ajustement précis de la force d'appariement sur l'oscillation pair/impair des masses expérimentales sera possible.

La seconde étude porte sur les méthodes de calculs au-delà du champ moyen visant à inclure les corrélations associées aux mouvements de grande amplitude dans les noyaux. Leurs effets sont introduits au moyen de la GCM et de la méthode du champ moyen projeté qui se caractérisent par l'utilisation d'un mélange de fonctions de champ moyen non-orthogonales comme fonction d'essai dans le processus variationnel. Une théorie de perturbation permettant pour la première fois de fonder ces calculs sur une base diagrammatique est développée. Dans le même temps, la resommation des corrélations à deux corps autorise la définition de l'interaction effective minimale renormalisant les divergences associées au cœur dur de l'interaction nucléon-nucléon libre dans ce contexte. Procédant à une approximation locale de cette interaction, la première prescription reposant sur des bases théoriques solides est proposée pour la dépendance en densité des forces effectives phénoménologiques à utiliser dans les calculs de mélange de configurations. Traitant d'une autre origine de la dépendance en densité de l'interaction, la possible renormalisation de l'effet des forces à plus de deux corps par une dépendance en la densité mixte est démontrée pour les calculs de mélange de configurations. La forme étendue de la force de Skyrme issue de ces développements formels est alors testée au moyen de calculs de mélange de configurations visant à reproduire le phénomène de coexistence de forme dans le ^{186}Pb .

Remerciements

Au risque de décevoir le lecteur avide de bons mots, je ne tenterai pas ici de faire preuve d'esprit ou d'originalité pour aller, une fois n'est pas coutume, droit au but.

Aller droit au but consiste à remercier très sincèrement et plus encore chaleureusement Paul Bonche d'avoir encadré ma thèse. Sans essayer de rappeler ses qualités scientifiques et humaines, je voudrais simplement m'enorgueillir ici de notre complicité et de la liberté dont il m'a délibérément pourvu dans le travail. Il m'a offert une place de choix à ses côtés dont j'espère avoir été digne.

Tous mes remerciements vont à Paul-Henri Heenen pour avoir non seulement accepté de rapporter ce travail mais aussi pour avoir toujours répondu à mes sollicitations, voire à mon goût du débat... à Jean-François Berger pour avoir rapporté ce travail avec la plus grande minutie... à Jacek Dobaczewski, Georges Bertsch, Philippe Chomaz et Pierre Billoir pour avoir participé au jury... à Michael Bender pour son aide d'une rare efficacité dans les derniers temps de mon travail de thèse... à Jacques Meyer et Georges Ripka pour nos discussions enthousiastes... au SPhT et à tous ses membres pour m'avoir offert un cadre de travail dont la qualité apparaît de manière toujours plus aigüe à mesure que le départ approche... à Sylvie Zaffanella pour nous apprendre qu'*efficacité souriante* n'est pas qu'un barbarisme... à Pierre Besson et Nicolas Alamanos pour avoir rendue possible ma rencontre avec Paul Bonche... à Dominique Hirondelet pour m'avoir initié aux théories quantiques qui fondent tout mon intérêt pour la physique... à Guillaume Romet-Lemonne pour avoir suggéré que la recherche m'irait peut-être moins mal que la finance... à Urko Reinosa pour m'avoir offert son amitié malgré la proximité professionnelle.

Pour revenir à l'essentiel, je terminerai cette séquence de remerciements en adressant les plus nourris et les plus profonds à ma famille.

Table des matières

1	Introduction.	11
1.1	Perspectives actuelles.	11
1.2	Traitement théorique du système nucléaire.	13
1.3	Méthode de champ moyen.	15
1.4	Notion de force effective.	16
1.5	Plan.	17
I	Problème à N corps et champ moyen.	19
2	Données de base.	21
2.1	Stratégie et données du problème.	21
2.2	Symétries et force nucléon-nucléon libre.	22
2.3	Les inconnues.	23
2.4	Restrictions immédiates.	23
3	Vers une approximation de champ moyen.	25
3.1	Position du problème.	25
3.2	Théorie de Goldstone-Brueckner.	26
3.2.1	Définitions.	27
3.2.2	Théorème de Gell-Mann-Low.	27
3.2.3	Formule de Goldstone et diagrammes associés.	28
3.2.4	Développement de l'énergie.	30
3.2.5	Resommation de Brueckner.	30
3.2.6	Choix du potentiel Γ^α et de l'état non perturbé.	34
3.2.7	Approximation de Brueckner-Hartree-Fock.	35
4	Méthodes du champ moyen auto-cohérent.	39
4.1	Formalisme Hartree-Fock.	39
4.1.1	Symétries et champ moyen.	42
4.1.2	Calculs HF contraints.	44
4.1.3	Noyau pair-pair.	44
4.1.4	Noyau pair-impair.	45
4.1.5	Interaction résiduelle.	45
4.2	Formalisme Hartree-Fock-Bogolyubov.	46

4.2.1	Symétries et champ moyen.	50
4.2.2	La base canonique.	50
4.2.3	Approximation BCS.	51
4.2.4	Noyau pair-pair.	52
4.2.5	Noyau pair-impair.	52
4.2.6	Interaction résiduelle.	54
4.2.7	HFB dans l'espace réel.	58
4.2.8	Prescription de Lipkin-Nogami.	60
4.3	Forces effectives.	61
4.3.1	Canal particule-trou.	63
4.3.2	Canal particule-particule.	65

II Lien entre noyaux pair-pair et pair-impair [39, 143]. 71

5	Version perturbative usuelle.	75
5.1	Hartree-Fock.	75
5.2	Hartree-Fock-Bogolyubov.	76
5.3	Schéma du problème à N corps.	77
6	Version perturbative revisitée.	79
6.1	Appariement non nul.	79
6.2	Limite d'appariement nul.	81
6.3	Schéma unifié du problème à N corps.	83
7	Energie de séparation d'un nucléon.	85
7.1	Théorème de Koopmans.	85
7.2	Limite d'appariement nul.	86
7.2.1	Ordre 2 en $\delta\bar{\rho}$: ajout du nucléon.	88
7.2.2	Ordre 2 en $\delta\bar{\rho}$: création d'une quasi-particule.	89
7.2.3	Réduction à l'ordre 1 en $\delta\bar{\rho}$	90
7.3	Prise en compte des corrélations d'appariement.	91
7.3.1	Ordre 2 en $(\delta\bar{\rho}, \delta\bar{\kappa}, \delta\bar{\kappa}^*)$: ajout du nucléon.	93
7.3.2	Ordre 2 en $(\delta\bar{\rho}, \delta\bar{\kappa}, \delta\bar{\kappa}^*)$: création d'une quasi-particule.	94
7.3.3	Réduction à l'ordre 1 en $(\delta\bar{\rho}, \delta\bar{\kappa}, \delta\bar{\kappa}^*)$	95
8	Calculs auto-cohérents [39].	97
8.1	Traduction du schéma pour les calculs auto-cohérents.	97
8.2	Validation quantitative du schéma.	98
8.3	Ajout du nucléon.	102
8.3.1	Limite d'appariement nul.	102
8.3.2	Prise en compte de l'appariement.	103
8.4	Création de la quasi-particule.	104
8.4.1	Limite d'appariement nul.	104
8.4.2	Prise en compte de l'appariement.	106

9 Oscillation des masses pair-impair [143].	111
9.1 Formules de différence de masses.	113
9.2 Présentation du modèle schématique.	113
9.3 Isotopes de cérium.	114
9.4 Isotopes d'étain.	118
9.5 Rôle du spectre de particules indépendantes.	120
10 Calculs auto-cohérents.	123
10.1 Isotopes d'étain.	123
10.2 Isotopes de cérium.	126
10.3 Rôle du spectre de particules indépendantes.	128
10.4 Autres régions de masse.	130
11 Extraction d'un gap d'appariement.	133
 III Problème à N corps au-delà du champ moyen.	 137
12 Formalisme variationnel.	141
12.1 Méthode de la Coordonnée Génératrice.	141
12.2 Restauration de symétrie.	144
12.2.1 Projection sur le nombre de particules.	144
12.2.2 Projection sur le moment angulaire.	145
12.3 Variation avant et après projection.	146
12.4 GCM et projection.	146
12.5 Dépendance en densité du hamiltonien.	147
12.6 Origines de la dépendance en densité du potentiel.	148
13 Théorie de perturbation étendue.	151
13.1 Développement de l'énergie.	152
13.2 Interaction effective.	153
13.3 Fonction d'onde de paire et propriétés de la force effective.	156
13.4 Approximation à l'ordre le plus bas.	157
13.5 GCM.	159
13.6 Projection.	160
13.7 Approximation de densité locale pour la matrice de Brueckner.	162
14 Dépendance en densité de la force due aux corrélations à deux corps.	167
14.1 Ansatz.	167
14.2 Simplification.	169
14.3 Champ Moyen.	170
14.4 Extension au mélange d'états produit.	171
14.5 Projection.	173
14.6 Au-delà de l'ordre le plus bas de la théorie de perturbation.	174

15 Renormalisation des forces à plus de deux corps.	175
15.1 GCM et force à trois corps.	176
15.2 Projection et force à trois corps.	179
15.3 Généralisation au cas des forces à K corps.	180
15.4 La force de Skyrme pour les calculs au-delà du champ moyen.	181
16 Calculs auto-cohérents.	183
16.1 Coexistence de formes dans le ^{186}Pb	183
16.1.1 Origine de la coexistence de forme dans le ^{186}Pb	184
16.1.2 Approximation statique.	185
16.1.3 Corrélations quadrupolaires.	188
16.1.4 Effet de la projection sur le nombre de nucléons.	195
16.1.5 Effet de la projection sur le moment angulaire.	202
16.2 Discussion.	207
16.3 Perspectives.	211
17 Conclusions.	213
A Éléments de matrice de G^α.	227
B Bases à un corps.	229
B.1 Noyau sphérique.	229
B.2 Noyau déformé axial.	229
B.3 Noyau en rotation.	230
B.4 Base propre de \hat{s}_z	230
B.5 Définition de l'opérateur K	231
B.6 Base invariante sous K	231
B.7 Base non-invariante sous K	232
C Invariance du hamiltonien sous renversement du temps.	233
C.1 Invariance de H	233
C.2 Brisure de symétrie au niveau du champ moyen.	233
D Éléments de matrice de couplage entre états de qp.	235
E Densités et fonctionnelle de Skyrme.	237
E.1 Densités à un corps.	237
E.2 Fonctionnelle de l'énergie.	238
F Limite HFB d'appariement nul.	243
G Propriétés des éléments de matrice de $v[\rho]$ et de ses dérivées.	247
H Éléments de matrice de $G^{(\beta,\alpha)}$.	249
I Propriétés de $v_{\text{Skyrme}}^{(\beta,\alpha)}$ pour la projection sur le moment angulaire.	251

J	GCM et force à deux corps dépendant de la densité corrélée.	253
K	Force à trois corps et projection.	255
	K.1 Équations du mouvement.	255
	K.2 Terme de réarrangement.	255

Chapitre 1

Introduction.

L'étude du noyau atomique est particulièrement riche d'enseignements du fait des voies nouvelles ouvertes depuis quelques années. La mise en place conjuguée d'accélérateurs de faisceaux radioactifs et de nouvelles générations de détecteurs s'est révélée extrêmement fructueuse, permettant la caractérisation de propriétés aussi nombreuses qu'inattendues. Ces programmes visent à explorer les différents degrés de liberté du noyau tels que l'isospin, la masse ou encore le moment angulaire. Les défis expérimentaux sont de taille puisqu'ils portent sur des systèmes peu liés, donc fragiles, et le plus souvent avec des taux de production très faibles nécessitant le traitement d'une statistique et d'un rapport signal sur bruit extrêmement défavorables. Comme dans la plupart des domaines de recherche, la marche en avant des découvertes expérimentales et de la compréhension théorique du système nucléaire est fortement couplée. Cela transparaît dès lors que l'on se risque à une présentation de leurs avancées respectives. Essayons donc de les mettre côte à côte en détaillant les problématiques actuelles de la structure nucléaire à basse énergie.

1.1 Perspectives actuelles.

L'étude des noyaux riches en neutrons en direction de la *drip-line* (limite de stabilité vis à vis de l'émission de particule correspondant à des excès de neutrons $(N - Z)/A$ de l'ordre de 0.5) constitue la voie principale de cette nouvelle recherche. Elle a déjà permis la caractérisation de nombreuses propriétés liées le plus souvent à la proximité du niveau de Fermi et du continuum d'états à une particule. Cette proximité du continuum d'états pour les derniers nucléons liés à la surface de Fermi donne naissance à des *peaux de neutrons* [1], et dans les cas les plus extrêmes aboutit même à la formation de *halos* [2] caractérisant des systèmes aux dimensions radiales gigantesques au regard du nombre de leurs constituants. Ces distributions de matière très étendues sont constituées de un ou deux neutrons périphériques dans les noyaux légers tandis qu'elles sont plus [3] ou moins [4] collectives dans les noyaux lourds. Parmi les noyaux légers, les halos Borroméen (n+n+cœur) tels que l' ^6He , le ^{11}Li ou le ^{14}Be sont particulièrement intéressants du fait de la non-liaison de chacun de leurs sous-systèmes à deux corps [5]. Le fait que le noyau présente une zone étendue de faible densité de neutrons peut également provoquer des groupements corrélés de particules, ou *clusters*. Enfin, le découplage des densités neutrons et protons engendre également l'existence de nouveaux modes collectifs de basse énergie

(notamment isovecteurs) [6, 7]. Au regard de ces propriétés émergentes, le couplage au continuum d'états doit être correctement incorporé dans le traitement théorique [8]. En particulier, l'effet de la diffusion de paires de nucléons dans les états d'énergie positive [9, 10, 7] engendrée par l'interaction résiduelle d'appariement dépend fortement de la façon dont le continuum est pris en compte. Il est à noter que la nécessité d'un traitement propre du continuum dans l'étude des états fondamentaux (exotiques) bénéficie du travail réalisé dans les noyaux chauds [11, 12]. Un autre problème captivant concerne la robustesse des gaps magiques traditionnels vis à vis de l'isospin du système. Plusieurs de ces gaps semblent diminuer au voisinage de la drip-line neutron. Tandis que cette disparition pour les nombres magiques $N = 8$ et $N = 28$ peut être simplement reliée aux propriétés isovectorielles de la force, celle du gap $N = 20$ traduit l'apparition plus complexe de comportements collectifs importants dans les isotones déficients en protons.

La théorie a beaucoup à apprendre des noyaux riches en neutrons en ce qui concerne les caractéristiques de la force nucléon-nucléon dans le noyau. Les propriétés de ces noyaux offrent des possibilités d'étude des canaux isovecteurs, pour le terme spin-orbit ou le canal d'appariement par exemple, du fait que leurs effets y sont fortement magnifiés. Ainsi, des mesures de rayons carrés moyens de neutrons et de la diffusivité de la densité de neutrons peuvent permettre de comprendre les propriétés de l'interaction dans des régions de densité faible très sensibles à l'appariement [6]. Les noyaux légers riches en neutrons sont également de bons systèmes pour caractériser les corrélations engendrées par la force nucléon-nucléon *nue* puisqu'ils permettent dans une certaine mesure de s'affranchir des effets du milieu sur l'interaction dans la région du halo.

Du côté de la drip-line proton (et au-delà), l'intérêt se porte par exemple sur les noyaux impairs qui, décroissant par émission d'un proton issu d'une résonance étroite, fournissent des informations sur la position et le moment orbital des états quasi-liés par la barrière Coulombienne. Cela permet de caractériser les propriétés de déformation du champ moyen à la surface des noyaux [13]. Une quarantaine de ces noyaux sont connus aujourd'hui [14]. D'autre part, la production dans cette zone de la table de masse de noyaux lourds $N \approx Z$ tel que l'étain ^{100}Sn [15] a ravivé le débat sur l'existence et la collectivité de l'appariement proton-neutron. Cette discussion est liée à l'existence de l'énergie de Wigner [16] et à la description des états d'isospin $T = 1$ et $T = 2$ dans les noyaux pair-pair $N = Z$ et les états $T = 0$ et $T = 1$ dans les noyaux impair-impair $N = Z$ [17].

Une autre activité importante concerne l'étude des noyaux superlourds. En effet, la variable de masse et la stabilité y sont testées de manière extrême au regard de la très forte répulsion Coulombienne existant dans ces noyaux. De fait, l'éventuelle stabilité de ces systèmes est directement liée aux effets quantiques de couches. Cette caractéristique fait des noyaux superlourds un cas d'étude unique du point de vue de la validation des modèles microscopiques (essentiellement de type *champ-moyen* dans cette région de la table de masse). En effet, si ces modèles justifient l'existence des noyaux tels que ceux observés à Dubna ($Z = 114$ et $Z = 116$) [18] par une stabilité suffisante vis à vis de la fission, ils ne s'accordent pas entre eux quant à la localisation précise d'un possible îlot de stabilité au-delà du nombre magique $Z = 82$ [19, 20, 21]. Cela reflète l'incertitude existante sur les spectres de particules indépendantes dérivés de forces ajustées dans des conditions très différentes, à savoir sur quelques propriétés de noyaux stables doublement magiques. En réalité, des calculs récents ont montré que l'utilisation de faisceaux de noyaux riches

en neutrons devrait rendre possible l'entrée dans une zone relativement étendue de plus grande stabilité, invalidant l'idée de trouver un nombre magique précis dans cette région de masse [21, 22].

Enfin (ceci n'ayant aucune valeur d'exhaustivité), une exotïcité importante concerne les états rotationnels à hauts spins ; cette exotïcité allant de paire avec le phénomène de super-déformation. Ce domaine d'étude aujourd'hui à maturité a permis la mise en exergue de nombreuses bandes rotationnelles dans les régions de masses $A = 80, 130, 150, 190 \dots$ [23, 24, 25, 26, 27, 28]. La comparaison des moments d'inertie théoriques et expérimentaux fournit des informations précieuses quant à la robustesse des corrélations d'appariement vis à vis du moment angulaire et de leur blocage dans les noyaux impairs. Cela constitue une observable importante [29, 30] puisque peu de choses sont connues sur le canal d'appariement de la force. Il est en effet aujourd'hui impossible de conclure quant au caractère de courte ou de longue portée du phénomène d'appariement, ni de dire dans quelle mesure il traduit un phénomène de volume/surface dans le noyau. À cela s'ajoute le fait que d'autres observables, telles que l'oscillation pair-impair des masses permettant l'étude des propriétés isovectorielles de ce canal, ne sont pas comprises en détails et n'autorisent donc pas une analyse pertinente. Les états rotationnels autorisent également l'étude des états intrus provenant des couches sphériques de grand moment angulaire et jouant un rôle central dans le comportement des moments d'inertie. Cela est utile à la validation des distributions théoriques d'états individuels au niveau de Fermi [30]. On commence également aujourd'hui à utiliser ces modes d'excitation pour sonder les termes impairs de la force vis à vis de l'opération de renversement du temps qui sont actifs dans ce cas mais peu connus par ailleurs et difficiles à isoler [31, 27, 32].

1.2 Traitement théorique du système nucléaire.

D'une manière générale, les modèles et les forces fonctionnant bien pour les noyaux connus s'extrapolent difficilement aux noyaux exotiques. Ceux-ci subissent donc par le biais de cette nouvelle manne d'informations un affinement extrêmement sélectif permettant d'en augmenter le pouvoir prédictif et la capacité à reproduire avec précision un ensemble toujours plus important de propriétés du noyau.

La complexité du système nucléaire suggère que sa description dépend autant de notre capacité à résoudre un problème complexe que du type de propriétés que l'on cherche à étudier. De fait, s'il n'existe pas autant de modèles théoriques que de propriétés du noyau, il en existe autant que de façons de poser le problème. Pour ce faire, il faut définir les degrés de liberté élémentaires du système ainsi que leur(s) mode(s) d'interaction. Au niveau le plus microscopique, il est possible de se représenter le noyau comme un ensemble de quarks échangeant des gluons et des photons. Dans un deuxième temps, on incorpore la notion de nucléons comme des hadrons échangeant des mésons. Les nucléons peuvent ensuite être considérés comme de simples fermions ponctuels interagissant par l'intermédiaire d'une force *nue* simulant l'échange de ces mesons entre deux nucléons isolés. Les mêmes fermions ponctuels peuvent aussi être vus comme interagissant par l'intermédiaire d'une force *habillée* par les effets du milieu, les degrés de liberté étant en fait les nucléons habillés par les interactions. Il est ensuite possible d'imaginer le noyau

comme composé de clusters de nucléons, notamment pour décrire les états excités des noyaux légers stables ou instables. Cette vision caractérise par exemple la description des noyaux à halos comme des systèmes à trois corps constitués d'un cœur et de deux nucléons périphériques interagissant par une force presque nue. Enfin, le niveau de description le plus macroscopique consiste à utiliser des degrés de liberté globaux. Le noyau est alors vu comme une goutte liquide dont les propriétés énergétiques, reliées essentiellement à sa forme, sont suggérées par les modèles sous-jacents ou par l'expérience.

Chacune de ces approches possède ses avantages, ses domaines d'application et les limitations inhérentes à la philosophie qui l'a motivée. Les modèles macroscopiques, par exemple, sont caractérisés par leur relative simplicité et un pouvoir prédictif restreint à certaines caractéristiques du noyau. Ces restrictions proviennent des simplifications contenues dans la façon même de considérer le système au départ. En allant vers les méthodes plus microscopiques, on repousse à une étape ultérieure les simplifications nécessaires à la résolution en proposant des méthodes contenant toute la complexité du problème et permettant de tout décrire *a priori*. Celles-ci possèdent donc un caractère plus fondamental. Les limitations sont imposées par notre capacité technique à résoudre le problème à une époque donnée dont la complexité dépend du nombre de degrés de liberté microscopiques incorporés explicitement. L'augmentation de ce nombre fait exploser la taille de l'espace des phases (espace de Hilbert pour les traitements quantiques) qu'il faut explorer *a priori*. Lorsque les nucléons sont traités explicitement par exemple, la taille de cet espace est liée à leur nombre, rendant la résolution exacte des noyaux lourds plus improbable. L'augmentation du nombre des degrés de liberté traités explicitement s'accompagne alors d'approximations visant à réduire l'espace de Hilbert visité à l'intérieur de l'espace de Hilbert à N corps total ; cette réduction se couplant ou non avec une renormalisation des effets omis. Schématiquement, l'effort dévolu au choix de ce sous-espace est inversement proportionnel à sa taille. Pour résumer, la problématique liée au choix du niveau de description, à celui des approximations considérées, à l'éventuelle renormalisation des effets manquants, et enfin à l'obtention des solutions, constitue *le problème à N corps*.

Afin d'être plus explicite, nous nous limitons à présent aux méthodes microscopiques applicables au calcul des noyaux finis et pertinentes pour la structure nucléaire à basse énergie. Au regard de la discussion précédente, cela correspond aux cas où les degrés de liberté élémentaires sont les nucléons. Dans ce cadre, notre intérêt se portera vers les méthodes auto-cohérentes de type champ-moyen faisant usage de forces nucléon-nucléon effectives phénoménologiques. Cela dit, nous considérons le système de N nucléons interagissant par l'intermédiaire d'une force nue à deux corps nucléon-nucléon, éventuellement complétée d'une force à trois corps, comme le problème de référence à résoudre. L'utilisation éventuelle d'une force à trois corps doit être comprise comme une renormalisation d'effets liés à la structure interne des nucléons, omise dans le point de vue adopté ici.

Selon cette définition du problème, il est aujourd'hui possible de calculer les états de basse énergie des noyaux jusqu'à la masse $A = 10$ par des calculs *ab initio* autorisant la prise en compte de toutes les corrélations dans le système [33]. Une connaissance précise de la force nucléon-nucléon libre est requise dans ces calculs. Cela est possible, tout au moins pour ses propriétés sur couche d'énergie. La forme de l'interaction est déterminée au moyen de modèles OBEP (One Boson Exchange Potential) tandis que l'ajustement de ses paramètres est réalisé sur les déphasages de la diffusion nucléon-nucléon jusqu'à des

énergies de l'ordre de 350 MeV. Nous reviendrons sur les propriétés d'une telle force que nous considérons comme une donnée du problème à N corps.

En ce qui concerne les noyaux plus lourds, les états de basse énergie ne sondent qu'une faible portion de l'espace de Hilbert et ne dépendent pas de l'entière complexité de la force nucléon-nucléon. Un effort considérable a été consacré depuis quarante ans au développement des forces effectives incluant l'essentiel de la physique et devant être utilisées dans des espaces restreints. Le modèle en couches et les méthodes de champ moyen auto-cohérents s'inscrivent dans ce cadre. Des calculs de modèle en couche utilisant des forces effectives dérivées de la force nue sont disponibles à l'heure actuelle jusqu'à la masse $A \approx 12$ [34, 35] et devraient être étendus au-delà. Les mêmes méthodes utilisant des forces phénoménologiques ajustées sur l'expérience permettent une description précise des noyaux jusqu'aux masses $A \approx 50$ [36]. En parallèle, quoique concernant plutôt des masses plus élevées, les méthodes du champ-moyen auto-cohérent relativistes ou non utilisant des forces phénoménologiques ajustées sur l'expérience sont en mesure de décrire un très grand nombre de propriétés statiques et dynamiques de basse énergie jusque dans les noyaux superlourds.

1.3 Méthode de champ moyen.

Les méthodes de champ moyen auto-cohérent incluant les corrélations d'appariement statiques (*Hartree-Fock + Bardeen-Cooper-Schrieffer* (HFBCS) ou *Hartree-Fock-Bogolyubov* (HFB)) fournissent dans leurs versions les plus modernes une excellente description des observables de volume du noyau. Ces observables concernent typiquement les masses, les rayons de charge et de neutrons, les propriétés de déformation, notamment les barrières de fission et certains cas de coexistence de forme, ainsi que les propriétés liées à l'appariement. Afin d'illustrer ce point, nous renvoyons le lecteur à l'article de revue [37] ainsi qu'aux références incluses. Les calculs de champ-moyen autorisent également, et cela pour un large choix de forces représentatives, une bonne prédiction des séquences de niveaux et des écarts entre niveaux occupés d'une part (états dits de *trous*), et non occupés d'autre part (états de *particules*) dans le spectre individuel. La plupart des forces de Skyrme prédisent malgré tout des écarts trop grands entre partenaires spin-orbitales dans les noyaux lourds [20]. D'un autre côté, la prédiction de trop grands écarts entre les états de trou et les états de particule autour d'un gap magique est salutaire dans le sens que les effets au-delà du champ moyen (couplage *particule-vibration*) sont connus pour combler ce désaccord [38]. Il faut également avoir à l'esprit que la comparaison entre les niveaux individuels théoriques et expérimentaux se fait par l'intermédiaire de différences de masses entre noyaux voisins jouxtant une couche magique. Cette méthode implique donc des noyaux impairs dont il faut considérer toutes les propriétés afin d'obtenir une comparaison significative [39].

Les calculs de champ moyen étendu permettent également une description riche des états excités de rotation à l'approximation de cranking [40], tandis que les spectres vibrationnels de basse énergie et les coexistences de formes requièrent une analyse au-delà du champ moyen au moyen de calculs de mélange de configurations de type *Méthode de la Coordonnée Génératrice* (GCM) [40]. En ce qui concerne les états vibrationnels de plus haute énergie tels que les résonances géantes, *l'approximation de phase aléatoire*

(RPA) [40], ou approximation des “petites amplitudes”, permet une reproduction quantitative des distributions de force même si la description des largeurs de ces résonances demanderait la prise en compte de la dissipation à deux corps.

Aussi satisfaisante soit-elle, toute étude contribuera à mettre en relief les manquements de la méthode et des forces effectives associées [41], permettant ainsi d’identifier les améliorations devant être apportées. Par exemple, l’étude des noyaux superlourds souligne à la fois l’importance et la difficulté d’obtenir des prédictions fiables sur le spectre de particules indépendantes dans une région aussi extrême. A l’autre extrémité de la table de masse, tandis que la disparition des gaps magiques $N = 28$ [42, 43, 44] et $N = 8$ [45, 46, 47] dans les isotones riches en neutrons traduit des propriétés inattendues de la force au niveau du champ moyen, l’étude précise de cette propriété met en relief ses manquements dans les canaux isovecteurs [48]. Dans certains cas, l’étude montre la nécessité d’aller explicitement au-delà du champ moyen. Ainsi, la structure en couches traditionnelle des isotones riches en neutrons $N = 20$ [49, 50, 51, 52, 48, 42, 44] ou des plombs déficients en neutrons $Z = 82$ [53, 54, 55, 56, 57] n’étant pas remise en cause dans les calculs de pur champ moyen, les effets dynamiques au-delà du champ moyen permettent une reproduction des données expérimentales dans ces systèmes.

1.4 Notion de force effective.

Dans les méthodes d’approximation du problème à N corps utilisant la notion de force effective, il est intéressant que les solutions approchées puissent être formellement reliées aux solutions exactes. Cela signifie que le lien entre elles doit être maîtrisé, ne serait-ce qu’en principe. Cette nécessité n’est pas incompatible avec la notion de force effective à partir du moment où sa définition respecte ce lien de principe, et cela même si la force incorpore une composante phénoménologique permettant une meilleure reproduction des données expérimentales.

Du point de vue du modèle en couche, des avancées significatives ont été faites récemment dans cette direction grâce à l’implémentation d’une idée ancienne consistant à le comprendre comme une théorie effective reliée au hamiltonien nucléaire initial par une resommation non-perturbative des corrélations (jusqu’à n corps) à courte portée [58, 59]. On trouve derrière cette démarche l’idée que les corrélations importantes à traiter explicitement pour décrire les états de basse énergie avec précision sont effectivement celles du modèle en couche. Les calculs quantitatifs correspondants ont été effectués avec succès jusqu’à la masse $A = 3$.

De leur côté, les théories du champ moyen auto-cohérent sont formulées en terme de fonctionnelles de l’énergie (reliée ou non à une force effective phénoménologique dépendant de la densité). La question essentielle est donc de savoir si cette fonctionnelle (ou la force à deux corps) peut être reliée à la force nucléon-nucléon libre. Cela est possible au travers des méthodes de perturbation de type Goldstone-Brueckner [60, 61, 62, 63, 64], même si les calculs explicites correspondants sont difficiles dans les noyaux finis et deviennent seulement aujourd’hui satisfaisants du point de vue quantitatif dans la matière nucléaire, notamment grâce à la prise en compte de forces à trois corps [65]. La lourdeur des calculs a poussé à l’utilisation de forces phénoménologiques ajustées sur l’expérience ; la théorie

de Goldstone-Brueckner servant alors à comprendre *la nature* de la force effective dans le noyau. Cela rend possible la définition de la fonctionnelle de l'énergie de champ moyen [66, 67, 68, 69] sur la base de techniques perturbatives du problème à N corps et autorise le lien formel avec la force nue. Cela doit également être le cas pour les calculs variationnels au-delà du champ moyen, ce qui n'est pas nécessairement vrai aujourd'hui. Ainsi, beaucoup d'efforts restent à faire concernant ce lien pour le rendre toujours plus explicite quel que soit le niveau d'approximation [8].

Nous allons maintenant présenter le contenu du mémoire dont la structure traduit la bipolarité de mon travail de thèse. Deux études "indépendantes" vont y être présentées : la première se situe au niveau du pur champ moyen, tandis que la seconde porte sur les mélanges de configurations au-delà de ce niveau d'approximation.

1.5 Plan.

Première partie : Cette partie sera tout d'abord dédiée à la justification de l'approximation de "champ moyen" dans le noyau. Cela sera fait au moyen de la théorie de Goldstone-Brueckner autorisant la compréhension du lien entre une telle approximation et l'écriture originale du problème à N corps. Etant donnée cette validation théorique, nous développerons les méthodes du champ moyen auto-cohérent HF et HFB. Tandis que les qualités des forces phénoménologiques utilisées feront l'objet d'une présentation rapide, nous discuterons plus longuement de certaines de leurs propriétés générales dans les canaux de champ moyen et d'appariement. Nous essayerons ainsi de faire état des débats existants à l'heure actuelle et de la vision, nécessairement partielle, que nous en avons. À ce stade se terminera la présentation des éléments théoriques connus depuis longtemps ou développés récemment. Même si cela n'est pas du ressort du travail original de thèse, il nous a semblé intéressant de les détailler afin d'inscrire ce travail original dans une perspective plus large et de préparer les discussions menées dans les deux parties suivantes. En particulier, la présentation des méthodes HF et HFB est nécessaire puisqu'une partie des travaux rapportés traite de leurs caractéristiques.

Seconde partie : La seconde partie porte sur la façon de comprendre et d'extraire des informations associées aux corrélations d'appariement dans les méthodes de champ moyen. Nous montrerons tout d'abord dans quelle mesure la compréhension du lien entre un noyau pair-pair et son voisin pair-impair est aujourd'hui incomplète dans la théorie de champ moyen. Nous mettrons en lumière le fait que la théorie HFB ne se marie pas correctement dans sa limite d'appariement nul avec la théorie de champ moyen sans appariement (méthode *Hartree-Fock* (HF)). Etudiant en détail l'ajout d'un nucléon dans la fonction d'onde, nous montrerons la nécessité de comprendre ce phénomène comme un processus se déroulant en deux étapes. Ce schéma permettra une description cohérente des systèmes pairs et impairs quelque soit l'intensité de l'appariement dans le système.

L'étape suivante consistera à tirer de cette analyse des informations sur deux canaux de la force effective impliqués dans le processus d'ajout d'un nucléon : les termes impairs vis à vis de l'opération de renversement du temps et la force d'appariement. Ainsi, nous revisiterons le théorème de Koopmans [70] en dérivant plusieurs formules d'approxima-

tion pour l'énergie de séparation d'un nucléon au niveau du champ moyen. Cela nous permettra d'extraire l'effet de la brisure de l'invariance par renversement du temps sur les énergies individuelles et sur l'énergie de liaison des noyaux impairs. Nous montrerons comment la contribution des termes impairs peut-être isolée. Concernant l'appariement, nous proposerons une analyse microscopique complète de l'oscillation pair-impair des masses dans les noyaux et montrerons dans quelle mesure cette observable est liée à un *gap d'appariement* proprement défini. Le but final de cette étude est de proposer une méthode d'analyse précise des propriétés de la force d'appariement utilisant à bon escient les données expérimentales. L'ensemble des résultats formels sera alors validé par des calculs de champ moyen auto-cohérent portant sur les noyaux sphériques d'étain et les noyaux déformés de cérium.

Troisième partie : La troisième partie sera dédiée à l'étude de certaines techniques du problème à N corps au-delà du champ moyen. Plus spécifiquement, nous nous intéresserons aux calculs de mélange de configurations consistant à élargir l'espace variationnel en écrivant la fonction d'onde d'essai sous la forme d'une combinaison linéaire de plusieurs champs moyens. Ce type d'extension est utile pour restaurer les symétries brisées au niveau du champ moyen et/ou pour décrire les modes collectifs de grande amplitude dans le noyau. La théorie de perturbation usuelle de Goldstone-Brueckner ne permettant pas de faire le lien formel entre de tels calculs variationnels et l'écriture initiale du problème à N corps, nous développerons une théorie de perturbation plus générale fournissant une base perturbative à ces calculs. Cela nous permettra également de comprendre les modifications formelles à apporter aux forces effectives en vue de leur utilisation dans ce contexte. Cette théorie de perturbation autorisera en particulier la généralisation au cas des mélanges de configurations de la dépendance en densité des forces effectives phénoménologiques associée à la resommation des corrélations à deux corps. Ainsi, et après nous être également penchés sur la renormalisation des forces à plus de deux corps, nous proposerons une extension de la force de Skyrme valable à la fois dans les calculs de champ moyen et dans les calculs de mélange de configurations. Cette prescription sera finalement testée au travers d'une étude portant sur la coexistence de forme dans le ^{186}Pb incluant l'effet de plusieurs de ces mélanges.

Première partie

Problème à N corps et champ moyen.

Chapitre 2

Données de base.

2.1 Stratégie et données du problème.

Nous avons explicité dans l'introduction l'enjeu du problème à N corps dont la résolution doit permettre de décrire les propriétés du noyau atomique à basse énergie. Cela revient à considérer N nucléons ponctuels non relativistes interagissant par l'intermédiaire d'une force statique à deux corps. Cette stratégie repose essentiellement sur deux hypothèses :

- Les effets dynamiques liés à la structure interne des nucléons (degrés de liberté mésoniques) sont négligeables. On prendra éventuellement leur effet en compte par l'intermédiaire d'une force statique à trois corps NNN .
- Les effets relativistes sont négligeables. Cela se justifie du point de vue cinématique en constatant que l'ordre de grandeur en énergie des problèmes de structure est donné par la profondeur du puit nucléaire qui est approximativement de 50 MeV tandis que la masse des nucléons est de l'ordre du GeV [40].

Étant données ces hypothèses, le hamiltonien gouvernant l'évolution des nucléons en interaction s'écrit dans le formalisme de la seconde quantification :

$$H = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{V}_{ijkl} c_i^\dagger c_k^\dagger c_l c_j , \quad (2.1)$$

où t_{ij} est l'élément de matrice de l'énergie cinétique, tandis que \bar{V}_{ijkl} est l'élément de matrice antisymétrisé de l'interaction à deux corps nucléon-nucléon libre ¹ :

$$\bar{V}_{ijkl} = \overline{\langle \phi_i \phi_k | V | \phi_j \phi_l \rangle} \equiv \langle \phi_i \phi_k | V | \phi_j \phi_l \rangle - \langle \phi_i \phi_k | V | \phi_l \phi_j \rangle . \quad (2.2)$$

Pour écrire ce hamiltonien, nous nous sommes donnés une base à un corps arbitraire caractérisée par le jeu d'opérateurs d'annihilation et de création $\{c_k, c_k^\dagger\}$ tels que les $\{c_k\}$ annihilent le vide de particule :

¹Le hamiltonien 2.1 contient également l'interaction Coulombienne V^{Coul} entre protons que nous omettons ici par commodité d'écriture.

$$c_k |0\rangle = 0 \quad \forall k. \quad (2.3)$$

Dans les formules précédentes ainsi que dans toute la suite de ce manuscrit, le nombre quantique caractérisant un état à un corps sera écrit en *minuscule* (k) s'il inclut les nombres quantiques de spin et d'isospin, et en *majuscule* (K) s'il ne les inclut pas. Nous reviendrons en détail sur la caractérisation des états individuels utilisés.

2.2 Symétries et force nucléon-nucléon libre.

La première difficulté du problème à N corps nucléaire repose sur notre incapacité à dériver depuis des principes premiers la force par l'intermédiaire de laquelle les nucléons interagissent. Cependant, cette interaction possède un certain nombre de propriétés d'invariance qui permettent d'en spécifier la forme.

Celle-ci est hermitienne, invariante sous l'échange des coordonnées des deux nucléons, invariante par translation d'espace-temps, invariante sous les réflexions d'espace, invariante sous rotation dans l'espace réel et dans l'espace d'isospin et enfin, invariante sous l'opération de renversement du temps [40]. Ces propriétés fondamentales conduisent à écrire la force sous la forme :

$$\langle \vec{r}'_1 s_1 t_1 \vec{r}'_2 s_2 t_2 | V | \vec{r}_1 s_1 t_1 \vec{r}_2 s_2 t_2 \rangle = V(\vec{r}, \vec{p}, \hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\tau}_1, \hat{\tau}_2) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}'_1) \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}'_2) \quad , \quad (2.4)$$

où $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ et $\vec{p} = (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)/2$ correspondent respectivement à la position et à l'impulsion relatives des deux nucléons en interaction. La dépendance en \vec{p} est une façon pratique de traiter la non-localité de la force. Les opérateurs $\hat{\sigma}_i$ et $\hat{\tau}_i$ sont les matrices de Pauli associées respectivement aux opérateurs de spin $\hat{s}_i = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_i$ et d'isospin $\hat{t}_i = \frac{1}{2}\hat{\tau}_i$ agissant sur la particule i dont l'état est caractérisé par les nombres quantiques correspondants s_i (σ_i) et t_i (τ_i) prenant les valeurs propres $\pm 1/2$ (± 1).

Cette force à deux corps est généralement décomposée en plusieurs termes identifiés comme la partie *centrale*, la force *tenseur* et le terme *spin-orbite* responsable des nombres magiques dans le potentiel nucléaire à un corps [40]. Chacun de ces termes possède une dépendance radiale qui ne peut-être fixée par des principes d'invariance. Il faut revenir d'une manière ou d'une autre à l'origine microscopique de la force pour les déterminer. Ainsi, les forces modernes contiennent un terme phénoménologique répulsif de courte portée tandis que les termes de moyenne et longue portées sont dérivés de l'échange d'un ou deux mésons [33]. Tel est le cas du potentiel Argonne v_{18} dont les paramètres ont été ajustés sur 1787 données de diffusion proton-proton et 2514 données de diffusion neutron-proton.

De manière schématique, on associe la force spin-orbite aux mésons σ ² et ω tandis que la force tenseur est produite par l'échange des mésons π et ρ . En terme de portée, la répulsion à courte portée est associée à l'échange du ω tandis que l'attraction à moyenne

²Le méson σ n'est qu'une manière phénoménologique de reproduire l'échange de deux pions π corrélés avec ou sans excitation intermédiaire des nucléons en interaction.

et longue portée est due aux mésons σ et π . Enfin, la dépendance en isospin de la force est modélisée par le méson ρ , tandis que celle en spin est liée au ω et au ρ .

L'élément le plus singulier de la force nucléaire est sans aucun doute son cœur répulsif à courte portée se faisant sentir jusqu'à une distance relative de l'ordre de 0.5 fm. Comme nous le verrons par la suite, cette caractéristique complique significativement le traitement du problème à N corps et nécessite l'introduction de méthodes non-perturbatives.

2.3 Les inconnues.

La résolution formelle du problème à N corps consiste en principe à déterminer les états propres $|\Theta_i\rangle$ de H :

$$H |\Theta_i\rangle = E_i |\Theta_i\rangle , \quad (2.5)$$

où les valeurs propres E_i constituent le spectre en énergie du noyau.

Ces états peuvent être choisis comme états propres de tous les générateurs infinitésimaux des transformations laissant le hamiltonien invariant et commutant entre eux. D'après les caractéristiques de la force nucléon-nucléon, il est donc possible de trouver ces états sous la forme d'états propres de l'impulsion totale \vec{P} , de l'opérateur de renversement du temps K ³, du moment cinétique total et de sa projection sur un axe (J^2, J_z), de l'opérateur de réflexion par rapport à l'origine des coordonnées (états de parité définie) et de l'opérateur nombre de particules N . Dans les noyaux légers, les états propres possèdent également de bon nombres quantiques d'isospin associés aux opérateurs (T^2, T_z) du fait de la faible brisure introduite par l'interaction Coulombienne. Les opérateurs J_z et T_z ont été ajoutés pour obtenir un ensemble complet d'observables commutantes.

2.4 Restrictions immédiates.

Dans la pratique le nombre de degrés de liberté du problème à N corps est tel qu'il est illusoire et inopportun de vouloir déterminer les fonctions d'onde elles-mêmes. En général, on s'intéresse directement aux observables associées à ces états qui, bien que toujours impossibles à déterminer exactement, ne dépendent pas de toute la complexité du système. Ces observables physiques s'expriment comme des valeurs moyennes d'opérateurs dans ces états ou par des éléments de matrice d'opérateurs de transition entre eux. La plus importante de ces quantités est évidemment l'énergie :

$$E_i = \frac{\langle \Theta_i | H | \Theta_i \rangle}{\langle \Theta_i | \Theta_i \rangle} , \quad (2.6)$$

mais on s'intéressera également au moment cinétique J_i , à la taille du noyau, aux énergies de séparation... ainsi qu'aux probabilités de transition associées aux modes de désexcitation du noyau telles que les transitions électromagnétiques de différentes multipolarités.

³La définition de cet opérateur est donnée dans l'annexe C.

Un exemple standard est donné par la transition électrique $E2$ entre l'état fondamental d'un noyau pair-pair $I^\pi = 0^+$ et le premier état excité $I^\pi = 2^+$. La probabilité de cette transition est reliée au premier ordre des perturbations à la probabilité de transition réduite [40] :

$$B(E2, 2_1^+ \rightarrow 0_1^+) = \frac{1}{5} \left| \langle \Theta_{0_1^+} || Q_2 || \Theta_{2_1^+} \rangle \right|^2, \quad (2.7)$$

où $\langle \Theta_{0_1^+} || Q_2 || \Theta_{2_1^+} \rangle$ est l'élément de matrice réduit de l'opérateur quadrupolaire électrique $Q_{2\mu}$ relié à l'élément de matrice $\langle \Theta_{0_1^+} | Q_{2\mu} | \Theta_{2_1^+} \rangle$ par le théorème de Wigner-Eckart [71].

Etant donné ce schéma, l'idéal serait évidemment de trouver des méthodes de résolution valables quelle que soit la valeur des nombres quantiques caractérisant les états du système, en particulier quels que soient l'énergie d'excitation, le nombre de nucléons dans le noyau ou encore l'asymétrie N/Z . La résolution est en fait plus ou moins difficile selon la situation et nous serons amenés à considérer des approximations se justifiant dans l'étude de tel ou tel sous-problème uniquement, et dont il faudra établir une hiérarchie claire afin de garder à l'esprit leur portée ainsi que leurs limites.

Chapitre 3

Vers une approximation de champ moyen.

3.1 Position du problème.

La premier niveau d'approximation pour décrire le noyau consiste à utiliser l'image d'un ensemble de Fermions indépendants évoluant dans un potentiel moyen à un corps créé par eux. Il s'agit de l'approximation de *champ moyen* suggérée par la possibilité de comprendre certaines propriétés du noyau à l'aide d'une structure en couches pour les nucléons, analogue à la structure en couches électroniques de l'atome. En particulier, cette idée provient de la découverte d'une surstabilité vis à vis de l'énergie de séparation d'un nucléon des noyaux ayant un nombre particulier de neutrons et/ou de protons : 2, 8, 20, 28, 50, 82 ... A l'instar des gaz rares qui possèdent des couches électroniques complètes, ces noyaux "magiques", ou "doublement magiques", sont interprétés comme des noyaux à couches de neutrons et/ou de protons complètes. Cette image a également été validée par des expériences mettant en relief le caractère quasi-indépendant des nucléons dans le noyau. Il s'agit de réactions directes de type $(p, 2p)$ ou bien de réactions de *stripping* (d, p) et *pickup* (p, d) [40].

La question pertinente est alors de savoir si cette image suggérée par les données expérimentales est justifiable du point de vue théorique. L'espoir est permis du fait du caractère fermionique des particules qui, en vertu du principe de Pauli, tendent à se tenir "éloignées" les unes des autres. D'un point de vue plus quantitatif, l'approximation de champ moyen revient à considérer une fonction de particules indépendantes, c'est à dire un déterminant de Slater $|\Phi_i\rangle = \prod_{i=1}^N c_i^\dagger |0\rangle$ ¹ construit sur une base à un corps donnée, comme une bonne approximation des vrais états propres $|\Theta_i\rangle$. Après avoir exprimé H dans la base à un corps appropriée, l'énergie approchée correspondante s'obtient sous la forme :

¹Dans la suite de ce mémoire, les états représentés par des vecteurs $|\Phi_i\rangle$ correspondront toujours à des états de (quasi)-particules indépendantes, autrement appelés *états produit*. Les vrais états propres $|\Theta_i\rangle$ seront également approximés par des états *corrélés* notés $|\Psi_i\rangle$.

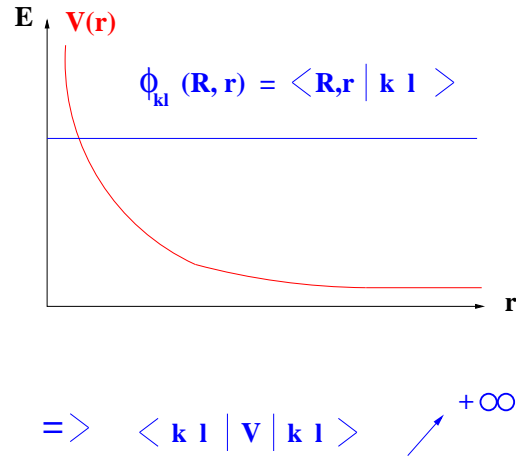


FIG. 3.1 – Divergence des éléments de matrice de l’interaction nue entre états de particules indépendantes.

$$E_i \approx \sum_{k=1}^N t_{kk} + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^N \bar{V}_{klkl} . \quad (3.1)$$

Cette énergie fait apparaître une somme double d’éléments de matrice de V entre des états à deux corps de particules indépendantes. Ces éléments de matrice présentent une forte divergence. En effet, deux particules indépendantes sont autorisées à interagir à très courte distance, ce qui, du fait du cœur répulsif de l’interaction nucléon-nucléon libre, engendre une énergie d’interaction artificiellement grande, voire infinie dans le cas d’un cœur infiniment répulsif. Alors, l’Eq. 3.1 est une mauvaise approximation de l’énergie exacte. Cela est illustré schématiquement sur la Fig. 3.1. En raison du caractère particulier de l’interaction entre les nucléons, le “peu de temps” que les particules passent à interagir à courte portée suffit à mettre à mal une description de particules indépendantes et donc la notion de champ moyen. Il est nécessaire d’inclure des corrélations dans le traitement dès lors que l’on s’intéresse au système nucléaire. Il est cependant possible de conserver la simplicité de la description en termes de particules indépendantes en incorporant un *minimum* de corrélations à travers la définition d’un hamiltonien effectif. Cela est possible dans le cadre de la théorie de perturbation de Goldstone-Brueckner que nous allons maintenant rappeler.

3.2 Théorie de Goldstone-Brueckner.

La méthode de Goldstone-Brueckner consiste à écrire un développement perturbatif du vrai état fondamental et de son énergie, et à montrer qu’une approximation pertinente de type champ moyen peut être définie. La validité de cette approximation est justifiée a posteriori par la petitesse des termes négligés dans le développement.

3.2.1 Définitions.

Nous définissons de façon a priori quelconque un hamiltonien à un corps h_0^α autorisé à briser des symétries de H . Ses états propres sont des déterminants de Slater notés $|\Phi_i^\alpha\rangle$ parmi lesquels l'état fondamental $|\Phi_0^\alpha\rangle$ est, par hypothèse, non-dégénéré. Nous spécifions ces définitions ainsi que le potentiel moyen associé Γ^α par :

$$h_0^\alpha = t + \Gamma^\alpha = \sum_n \epsilon_{\alpha_n} \alpha_n^\dagger \alpha_n \quad , \quad (3.2)$$

$$h_0^\alpha |\Phi_i^\alpha\rangle = \mathcal{E}_i^\alpha |\Phi_i^\alpha\rangle \quad , \quad (3.3)$$

où $\{\alpha_n\}$ définit une base à un corps diagonalisant h_0^α avec le spectre ϵ_{α_n} . Par simplicité, nous supposons dans la suite que l'indice i est discret et que les énergies \mathcal{E}_i^α sont ordonnées dans l'ordre croissant. Le hamiltonien initial H peut être réécrit en fonction de h_0^α sous la forme :

$$H = h_0^\alpha + h_1^\alpha \quad , \quad (3.4)$$

où

$$h_1^\alpha = V - \Gamma^\alpha \quad , \quad (3.5)$$

est l'interaction résiduelle associée à h_0^α .

3.2.2 Théorème de Gell-Mann-Low.

Le théorème adiabatique de Gell-Mann-Low [72] assure qu'un état propre de H peut être obtenu comme l'évolué adiabatique de l'état fondamental non-dégénéré de h_0^α depuis $t = -\infty$ jusqu'à $t = 0$. Ce théorème ne permet pas d'affirmer que l'état propre de H ainsi obtenu est l'état fondamental. Nous considérerons malgré tout que tel est le cas [73]. Cela se traduit analytiquement par :

$$|\Theta_0^\alpha\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{U_\epsilon^\alpha(0, -\infty) |\Phi_0^\alpha\rangle}{\langle \Phi_0^\alpha | U_\epsilon^\alpha(0, -\infty) | \Phi_0^\alpha \rangle} \quad . \quad (3.6)$$

Dans $|\Theta_0^\alpha\rangle$, l'exposant α rappelle à partir de quel état non-perturbé $|\Phi_0^\alpha\rangle$ le vrai état fondamental est obtenu. L'opérateur d'évolution adiabatique U_ϵ^α dans la représentation interaction [73] est défini par :

$$\begin{aligned} U_\epsilon^\alpha(t, t_0) &= e^{ih_0^\alpha t/\hbar} U_\epsilon(t, t_0) e^{-ih_0^\alpha t_0/\hbar} \\ &= e^{ih_0^\alpha t/\hbar} e^{-i \int_{t_0}^t H(\epsilon, \tau) d\tau/\hbar} e^{-ih_0^\alpha t_0/\hbar} \quad , \end{aligned} \quad (3.7)$$

où U_ϵ (sans indice α) est l'opérateur d'évolution dans la représentation de Schrödinger. La dérivation de l'Eq. 3.6 repose sur deux propriétés fondamentales de la mécanique quantique [71, 73] :

- (1) Lorsqu'un état propre du hamiltonien $H(t_0)$ évolue adiabatiquement depuis $t = t_0$, un état propre du hamiltonien $H(t_1)$ est obtenu à un instant ultérieur $t = t_1$.
- (2) Il est possible de trouver un hamiltonien dépendant adiabatiquement du temps $H(\epsilon, t)$ se réduisant au hamiltonien à un corps h_0^α dans la limite $t_0 \rightarrow -\infty$ et au vrai hamiltonien du système H à $t_1 = 0$. Ce hamiltonien auxiliaire utilisé dans U_ϵ^α , et enclenchant progressivement la perturbation h_1^α , est donné par :

$$H(\epsilon, t) = h_0^\alpha + \exp(-\epsilon|t|) h_1^\alpha \quad , \quad (3.8)$$

où ϵ est un nombre positif proche de zéro. À des temps grands, à la fois dans le passé et dans le futur, le hamiltonien défini par l'Eq. 3.8 se réduit effectivement à h_0^α qui présente une solution connue, tandis qu'à $t = 0$ il égale bien le hamiltonien exact du système en interaction. En prenant la limite $\epsilon \rightarrow 0$ à la fin du calcul, les résultats sont indépendants de ce paramètre. Notons pour la suite que l'obtention de la formule 3.6 ne consiste en aucun cas à appliquer l'opérateur d'évolution correspondant au vrai hamiltonien H sur un état "à $t_0 = -\infty$ ".

La normalisation de l'état fondamental $|\Theta_0^\alpha\rangle$ est telle que $\langle \Phi_0^\alpha | \Theta_0^\alpha \rangle = 1$. Elle est fixée par le dénominateur $\langle \Phi_0^\alpha | U_\epsilon^\alpha | \Phi_0^\alpha \rangle$ dans l'Eq. 3.6. Ce choix autorise l'élimination des parties vide/vide disconnectées dans le numérateur [61]. Cette propriété est cruciale car la présence de ces diagrammes fait diverger le numérateur comme le dénominateur dans la limite $\epsilon \rightarrow 0$.

3.2.3 Formule de Goldstone et diagrammes associés.

En développant U_ϵ^α en puissance de h_1^α et en effectuant les intégrations en temps dans l'expression 3.6, Goldstone [61] a fourni un développement perturbatif de l'état fondamental $|\Theta_0^\alpha\rangle$ autorisant une représentation diagrammatique et s'écrivant sous la forme :

$$|\Theta_0^\alpha\rangle = \sum_n \left(\frac{1}{\mathcal{E}_0^\alpha - h_0^\alpha} h_1^\alpha \right)^n |\Phi_0^\alpha\rangle_{\text{lié}} \quad , \quad (3.9)$$

où l'indice *lié* signifie que le fondamental non-perturbé $|\Phi_0^\alpha\rangle$ ne figure pas comme état intermédiaire dans les diagrammes.

Le développement 3.9 est une expression perturbative fonction des puissances successives de l'interaction résiduelle, c'est à dire des puissances de V et Γ^α . Afin de pouvoir dessiner les diagrammes de Goldstone associés, il faut insérer un ensemble complet d'excitations particule-trou (p-t) $|\Phi_i^\alpha\rangle$ relativement au vide d'excitation $|\Phi_0^\alpha\rangle$ entre chaque

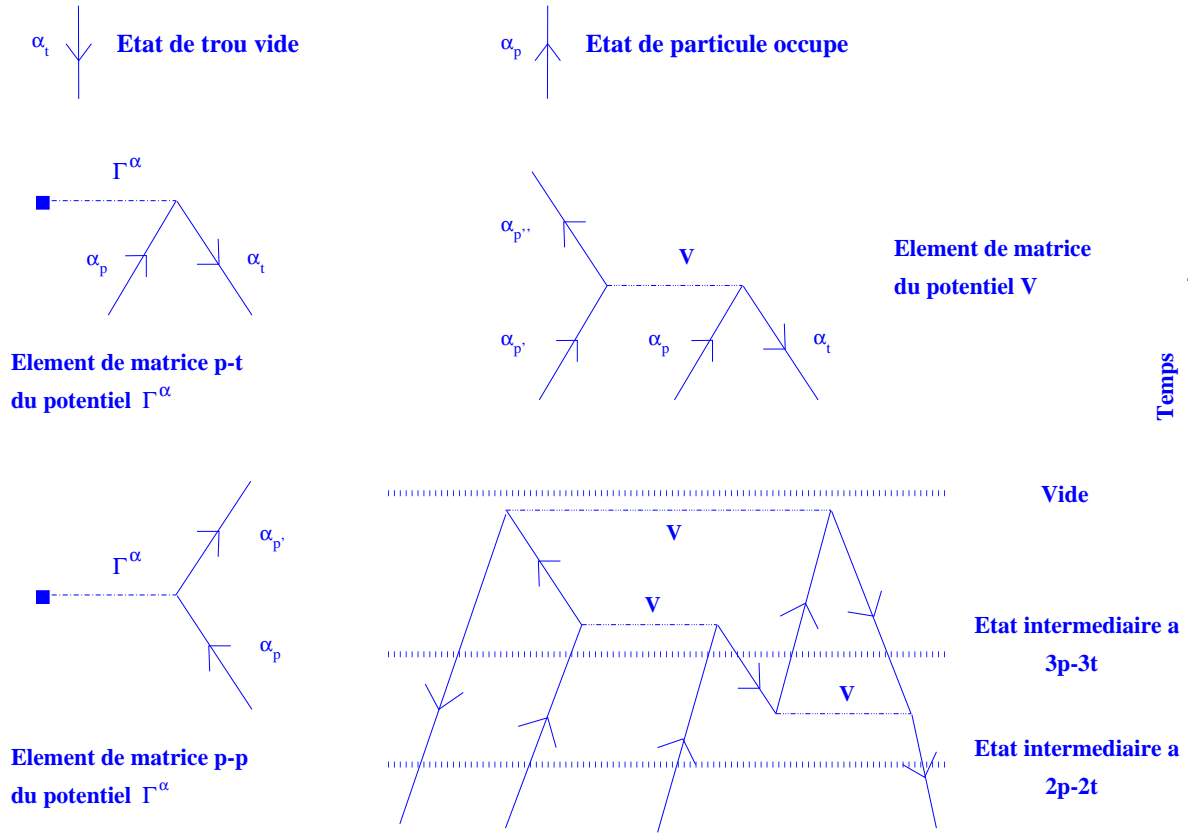


FIG. 3.2 – Diagrammes de Goldstone : définition des propagateurs non-perturbés correspondant aux états de trou et de particule, exemples d'éléments de matrice de la force à deux corps V et du potentiel moyen Γ^α . Cette figure présente également la façon d'identifier un état intermédiaire à N corps.

opérateur intervenant dans la formule 3.9. L'état $|\Phi_0^\alpha\rangle$ n'apparaît que comme état initial et éventuellement final dans un diagramme en vertu du caractère lié du développement. Une fois cela réalisé, l'expression 3.9 peut être traduite par une représentation diagrammatique. Explicitons quelques règles nécessaires à l'écriture et à la compréhension de ces diagrammes.

Dans un diagramme, les états (individuels) de trous définis comme les états occupés dans le vide $|\Phi_0^\alpha\rangle$ sont représentés par des propagateurs (flèches) dirigés vers le bas lorsqu'ils sont vides. Les états de particules définis comme les états non-occupés dans le vide sont représentés par des propagateurs orientés vers le haut lorsqu'ils sont occupés. Un état de trou occupé ou un état de particule vide n'apparaît pas explicitement dans un diagramme. La lecture d'un diagramme se fait de bas en haut (sens du temps) et correspond à la lecture d'un terme de la formule 3.9 de la droite vers la gauche. Ainsi, on pourra comprendre les actions successives de l'interaction à deux corps V ou du champ Γ^α comme créant, diffusant ou recombinant des paires p-t. Des exemples sont donnés sur la Fig. 3.2. Entre l'action de deux opérateurs V et/ou Γ^α , il est possible de tracer une ligne horizontale pour expliciter l'état intermédiaire $|\Phi_i^\alpha\rangle$ dans lequel le système à N corps se trouve. D'après la formule 3.9, chaque état intermédiaire sera pondéré par le propagateur à N

corps non-perturbé $(\mathcal{E}_0^\alpha - \mathcal{E}_i^\alpha)^{-1} = (\sum \epsilon_{\alpha_{t_i}} - \sum \epsilon_{\alpha_{p_i}})^{-1}$ dans le calcul d'un diagramme. Nous ne rentrons pas d'avantage dans le détail des règles nécessaires à leur calcul, et nous invitons le lecteur à se reporter à la Ref. [61]. Dans le présent travail nous ne calculerons explicitement que des diagrammes simples ne justifiant pas une présentation plus détaillée de ces règles.

3.2.4 Développement de l'énergie.

Le schéma perturbatif qui vient d'être développé pour la fonction d'onde du vrai état fondamental possède un équivalent pour l'énergie propre $E_0 = \mathcal{E}_0^\alpha + \Delta\mathcal{E}_0^\alpha$. La formule de Gell-Mann-Low correspondante est obtenue en effectuant le produit scalaire de $H | \Theta_0^\alpha \rangle$ avec le bra non-perturbé $\langle \Phi_0^\alpha |$. L'expression de la correction $\Delta\mathcal{E}_0^\alpha$ s'écrit :

$$\Delta\mathcal{E}_0^\alpha = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\langle \Phi_0^\alpha | h_1^\alpha U_\epsilon^\alpha(0, -\infty) | \Phi_0^\alpha \rangle}{\langle \Phi_0^\alpha | U_\epsilon^\alpha(0, -\infty) | \Phi_0^\alpha \rangle} , \quad (3.10)$$

tandis que la formule de Goldstone qui s'en déduit prend la forme :

$$\Delta\mathcal{E}_0^\alpha = \sum_n \langle \Phi_0^\alpha | h_1^\alpha \left(\frac{1}{\mathcal{E}_0^\alpha - h_0^\alpha} h_1^\alpha \right)^n | \Phi_0^\alpha \rangle_{\text{lié}} , \quad (3.11)$$

où la somme porte sur tous les diagrammes liés sans ligne externe (diagrammes vide/vide).

3.2.5 Resommation de Brueckner.

Grâce à ces écritures perturbatives, il est possible d'inscrire l'approximation de champ moyen dans un cadre général. En effet, l'approximation d'ordre zéro des développements perturbatifs de Goldstone donnent pour la fonction d'onde et l'énergie de l'état fondamental du système en interaction :

$$| \Theta_0^\alpha \rangle^{n=0} = | \Phi_0^\alpha \rangle , \quad (3.12)$$

et

$$\begin{aligned} E_0^{n=0} &= \mathcal{E}_0^\alpha + \langle \Phi_0^\alpha | h_1^\alpha | \Phi_0^\alpha \rangle \\ &= \langle \Phi_0^\alpha | t + V | \Phi_0^\alpha \rangle \\ &= \sum_{\alpha_t=1}^N t_{\alpha_t \alpha_t} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha_t, \alpha_{t'}=1}^N \bar{V}_{\alpha_t \alpha_{t'} \alpha_t \alpha_{t'}} . \end{aligned} \quad (3.13)$$

Ces expressions correspondent précisément à l'approximation de champ moyen introduite dans la section 3.1. Logiquement, cette approximation de l'énergie à l'ordre 0 des

perturbations souffre des pathologies identifiées dans cette précédente section. En fait, dès lors que les développements 3.9 et 3.11 exprimés en termes des éléments de matrice de V entre des états de particules indépendantes sont coupés à un ordre fini n_{max} , des divergences liées au cœur dur apparaissent et fournissent de mauvaises approximations des quantités exactes. Bien évidemment, la sommation de tous les termes résoud formellement ce problème de telle sorte que les solutions exactes ont les bonnes propriétés. Il apparaît maintenant plus clairement dans quelle mesure l'approximation de champ moyen faillit et comment des resommations non-perturbatives sont nécessaires pour corriger les pathologies trouvées dans les développements perturbatifs écrits en terme de l'interaction nucléon-nucléon libre. Ce constat met en relief le fait suivant : même si les degrés de liberté naturels du problème sont les nucléons, les degrés de liberté pertinents dans le noyau vont en réalité être des nucléons habillés par les interactions et interagissant par l'intermédiaire d'une force effective elle-même renormalisée par les effets du milieu.

Brueckner [60] a en effet constaté que pour chaque interaction V impliquée dans un diagramme lié, il est possible de trouver dans les développements 3.9 et 3.11 une série infinie de diagrammes en tous points identiques au premier excepté qu'une succession d'interactions V diffusant les nucléons dans des états de particule se trouve en lieu et place de l'interaction initiale. Cet ensemble est restreint aux diagrammes pour lesquels la succession d'interactions se produit avant que toute autre n'ait lieu ailleurs dans le diagramme. Il est alors possible de grouper cette série infinie pour ne considérer qu'un seul diagramme où l'interaction nue est remplacée par une matrice de réaction G^α sommant les échelles p - p de Brueckner. Cette matrice de réaction joue le rôle d'une interaction effective et est appelée *matrice de Brueckner*. La sommation des échelles à laquelle elle correspond est représentée diagrammatiquement sur la Fig. 3.3 et s'écrit analytiquement sous la forme d'une équation auto-cohérente :

$$G^\alpha(W_\alpha) = V + V \frac{Q^\alpha}{W_\alpha - h_0^\alpha} G^\alpha(W_\alpha) , \quad (3.14)$$

où

$$Q^\alpha = \sum_{\epsilon_{\alpha p}, \epsilon_{\alpha p'} > \epsilon_F^\alpha} |\alpha_p \alpha_{p'}\rangle \langle \alpha_p \alpha_{p'}| . \quad (3.15)$$

L'opérateur de Pauli Q^α agit dans l'espace des états à deux particules en excluant les états occupés dans le vide non-perturbé $|\Phi_0^\alpha\rangle$. La dépendance en W_α apparaissant dans la définition de G^α traduit le fait que l'interaction effective de deux nucléons dans le milieu nucléaire dépend de l'énergie des autres nucléons au moment de cette interaction. Les éléments de matrice de $G^\alpha(W_\alpha)$ ainsi que la définition précise de W_α sont donnés dans l'annexe A.

Itérer l'Eq. 3.14 permet de constater que G^α prend en compte l'interaction entre deux particules à tous les ordres dans l'interaction V en présence des autres nucléons. Il est alors possible de montrer [40] que le remplacement de la force nue par l'interaction effective G^α , résoud le problème lié au cœur dur de l'interaction. En effet, la sommation des échelles corrèle deux particules de telle sorte que leur fonction d'onde $\psi_{pq}^\alpha(W_\alpha, \vec{r}, \vec{R})$ [74] définie par :

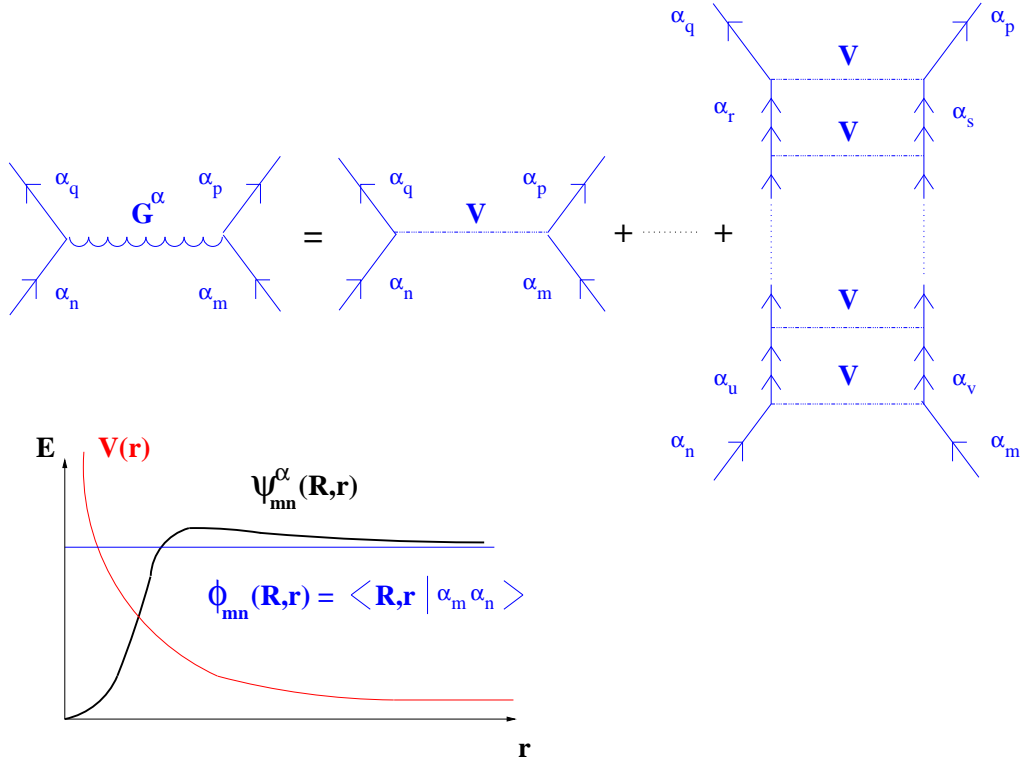


FIG. 3.3 – Représentation diagrammatique de la matrice de réaction G^α sommant les échelles p-p définies par rapport au vide $|\Phi_0^\alpha\rangle$. Dans chaque échelle, toutes les interactions V (sauf éventuellement la première et la dernière) diffusent les nucléons depuis et vers des états de particule en dehors de la mer de Fermi. La définition utilisée requiert qu'il n'y ait aucune interaction dans le reste du diagramme entre la première et la dernière interaction de l'échelle. Enfin, l'effet de cette resommation non-perturbative est illustré par le comportement de la fonction à deux particules corrélée correspondante. On constate que cette fonction s'annule dans la zone du cœur dur de l'interaction V .

$$\langle \vec{r}, \vec{R} | \psi_{pq}^\alpha(W_\alpha) \rangle = \langle \vec{r}, \vec{R} | V^{-1} G^\alpha(W_\alpha) | \alpha_p \alpha_q \rangle \quad , \quad (3.16)$$

s'annule rapidement lorsque la distance relative entre les nucléons devient de l'ordre de la portée du cœur répulsif. Ainsi, les éléments de matrice de G^α entre états de particules indépendantes :

$$\langle \alpha_r \alpha_s | G^\alpha(W_\alpha) | \alpha_p \alpha_q \rangle = \langle \alpha_r \alpha_s | V | \psi_{pq}^\alpha(W_\alpha) \rangle \quad , \quad (3.17)$$

ne présentent plus de divergence. Ce résultat est schématiquement reproduit sur la Fig. 3.3.

En groupant de proche en proche toutes les interactions V intervenant dans les développements perturbatifs de Goldstone, il devient finalement possible de les récrire en terme des éléments de matrice de $G_1^\alpha(W_\alpha) = G^\alpha(W_\alpha) - \Gamma^\alpha$ et d'obtenir ainsi des formules de perturbation ne présentant plus de pathologie. De cette manière, les expressions 3.9 et 3.11 sont remplacées par les développements perturbatifs de *Goldstone-Brueckner* prenant la forme :

$$| \Theta_0^\alpha \rangle = \sum_n \left(\frac{1}{\mathcal{E}_0^\alpha - h_0^\alpha} G_1^\alpha(W_\alpha) \right)^n | \Phi_0^\alpha \rangle_{lie/irred.} \quad , \quad (3.18)$$

et

$$\Delta \mathcal{E}_0^\alpha = \sum_n \langle \Phi_0^\alpha | G_1^\alpha(W_\alpha) \left(\frac{1}{\mathcal{E}_0^\alpha - h_0^\alpha} G_1^\alpha(W_\alpha) \right)^n | \Phi_0^\alpha \rangle_{lié/irred.} \quad . \quad (3.19)$$

Afin d'éviter un double comptage, la somme porte maintenant sur les diagrammes liés et *irréductibles* [61]. Cela signifie que les diagrammes présentant deux interactions G^α successives jointes par des états de particule sont exclus si aucune interaction n'intervient entre les deux dans le diagramme. Le schéma de Brueckner n'est finalement rien d'autre qu'une réorganisation des diagrammes dont le “paquet minimal”, ou autrement dit l'ordre du développement, est maintenant défini par G^α qui renormalise les corrélations à deux corps. Il s'agit d'une réécriture en fonction du nombre de lignes de trou indépendantes dans les diagrammes, ce qui correspond à un développement en puissances de la densité. Le paramètre perturbatif associé (Le “wound parameter [74]”) justifie alors un développement en perturbation jusqu'à environ deux à trois fois la densité de saturation de la matière nucléaire. Naturellement, l'approximation à un ordre donné du développement sera d'autant meilleure que la densité est basse. Ce schéma doit être vu comme la procédure minimale nécessaire à la résolution du problème lié au cœur dur de l'interaction nue. Des traitements plus élaborés mettant en jeu une renormalisation systématique des propagateurs et des vertex d'interaction existent, comme par exemple les approches auto-cohérentes fondées sur l'utilisation des fonctions de Green [75, 76].

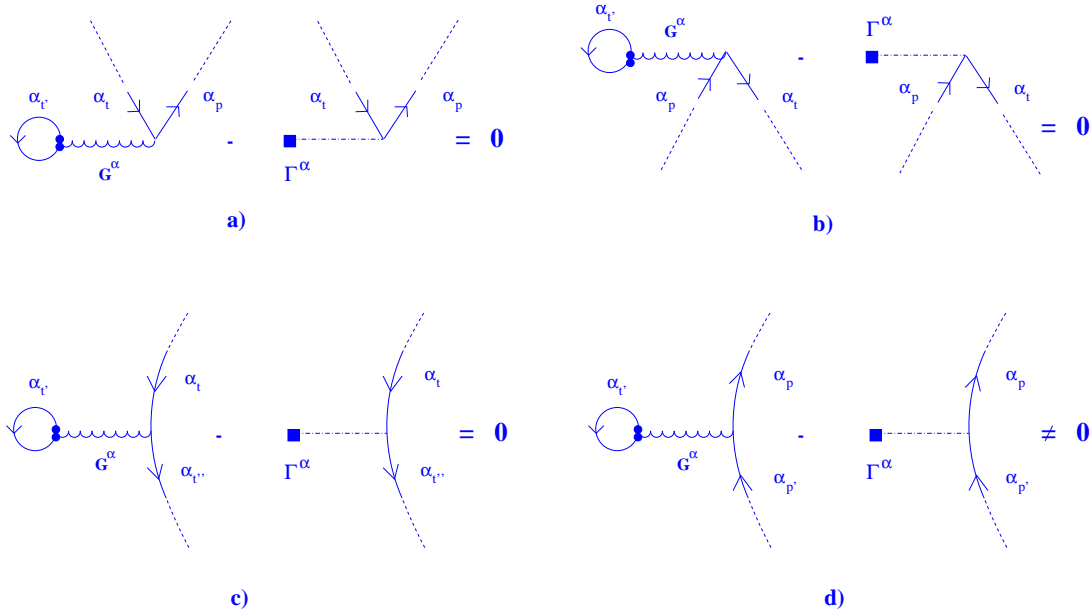


FIG. 3.4 – Diagrammes éliminés dans la fonction d'onde et dans l'énergie de l'état fondamental par le choix de Brueckner-Hartree-Fock pour le potentiel de champ moyen Γ^α . Les pointillés signifient que la partie non représentée des deux diagrammes considérés est identique bien que quelconque.

3.2.6 Choix du potentiel Γ^α et de l'état non perturbé.

Sans entrer dans le détail, nous discutons le choix du propagateur non-perturbé à un corps. Jusqu'ici, nous avons sous-entendu que le potentiel moyen Γ^α et donc le hamiltonien non-perturbé h_0^α étaient quelconques. Bien que cela soit vrai (à la condition que h_0^α ait un fondamental non-dégénéré), il est clair que la capacité à approcher la solution exacte à un ordre donné du développement va dépendre crucialement de ce choix [77]. La littérature concernant le choix des éléments de matrice p-p, p-t et t-t de Γ^α est extrêmement riche, voire polémique [76, 78] ; c'est pourquoi nous restons superficiels.

La première idée consiste à prendre un hamiltonien à un corps purement phénoménologique et fixé a priori. Ce choix souffre de son manque de caractère systématique. Un choix plus élaboré est de définir Γ^α par analogie avec le potentiel HF en remplaçant l'interaction nue par la matrice G^α . Il s'agit du choix dit de Brueckner-Hartree-Fock (BHF). Cela s'écrit :

$$\langle \alpha_i | \Gamma^\alpha | \alpha_j \rangle = \sum_{\alpha_k, \alpha_{k'}} \langle \alpha_i \alpha_k | G^\alpha(0) | \alpha_j \alpha_{k'} \rangle \rho_{\alpha_k \alpha_{k'}}^\alpha, \quad (3.20)$$

pour les éléments de matrice t-t, p-t et p-p. La matrice densité à un corps ρ^α du vide $|\Phi_0^\alpha\rangle$, définie dans une base $\{c_i\}$ quelconque par :

$$\rho_{c_s c_r}^\alpha = \langle c_s | \hat{\rho}^\alpha | c_r \rangle = \frac{\langle \Phi_0^\alpha | c_r^\dagger c_s | \Phi_0^\alpha \rangle}{\langle \Phi_0^\alpha | \Phi_0^\alpha \rangle}, \quad (3.21)$$

est diagonale dans la base $\{\alpha_k\}$ de telle sorte que $\rho_{\alpha_k \alpha_{k'}}^\alpha = \delta_{kt} \delta_{k't}$.

Dans l'Eq. 3.20, G^α est *sur couche d'énergie* ($W_\alpha = 0$, cf. annexe A). Cette définition permet d'éliminer un grand nombre de diagrammes dans le développement de la fonction d'onde et de l'énergie. Les diagrammes en question sont donnés sur la Fig. 3.4. Sur cette figure, les diagrammes a) et b) caractérisent les insertions aux vertex. Ils impliquent une interaction G^α avec les états de la mer de Fermi d'une part et un élément de matrice p-t du potentiel moyen Γ^α d'autre part. Le diagramme c) représente une insertion sur ligne de trou. Même lorsque les interactions G^α ne sont pas sur couche d'énergie ($W_\alpha \neq 0$), ces trois groupes de diagrammes s'annulent pour la définition 3.20 de Γ^α en vertu d'un groupement astucieux ne différant que par l'ordre des interactions dans le temps [79, 80]. À l'inverse, les insertions sur lignes de particule ne peuvent être annulées d'un point de vue général par aucune définition des éléments de matrice p-p $\langle \alpha_p | \Gamma^\alpha | \alpha_{p'} \rangle$ comme cela est schématisé sur la Fig. 3.4 d). Les deux parties de ce diagramme doivent donc être calculées explicitement. Le choix des éléments de matrice p-p du potentiel Γ^α a fait l'objet d'une controverse particulièrement intense. Nous ne rentrons pas plus avant dans le rappel de ce débat et renvoyons le lecteur aux Ref. [81, 82, 83, 84, 85]. Enfin, il est intéressant de mentionner qu'un choix légèrement plus élaboré que celui de BHF se révèle nettement plus performant du point de vue quantitatif [78, 86, 68]. Ce choix consiste à inclure trois diagrammes d'ordre supérieur permettant de prendre en compte le potentiel de réarrangement [87] et d'améliorer significativement les densités dans les noyaux lourds ainsi que l'accord entre les énergies individuelles théoriques et les énergies de séparation [68, 84, 88]. Autrement dit, la prise en compte de ces diagrammes d'ordre supérieur dans la définition du potentiel à un corps autorise l'annulation d'un plus grand nombre de diagrammes et fait de l'ordre zéro une meilleure approximation pour les observables à un corps.

Nous n'irons pas plus avant dans la présentation de la théorie de Goldstone-Brueckner et les propriétés de la matrice G^α . Pour une présentation détaillée, nous renvoyons aux Ref. [60, 61, 74, 78]. Nous mentionnons simplement ici qu'en régularisant le cœur dur de l'interaction à travers la sommation des échelles de Brueckner, les corrélations de courte portée associées à l'échange de mésons lourds ne sont pas les seules à induire des effets de milieu dans la force effective. On constate en particulier que ces effets sont pour une bonne part associés à la longue portée, i.e à la force tenseur de l'interaction nue [89, 90]. Cela est dû à la forte dépendance de la contribution de la force tenseur à l'énergie vis à vis de l'opérateur de Pauli Q^α . Cela suggère qu'une partie des effets du milieu générés par l'échange de pions est pris en compte par la sommation des échelles. Bien évidemment, la théorie de Goldstone-Brueckner ne prenant pas en compte les effets dynamiques liés aux degrés de liberté mésoniques, des traitements plus élaborés du problème à N corps les incluant explicitement sont nécessaires pour décrire quantitativement leurs effets [91].

3.2.7 Approximation de Brueckner-Hartree-Fock.

Pour terminer cette partie, nous nous penchons sur l'ordre le plus bas du développement perturbatif de l'énergie en fonction de la matrice G^α . Il s'agit de l'approximation dite de Brueckner-Hartree-Fock incluant tous les diagrammes à deux lignes de trou dans le calcul de l'énergie. On tire de l'Eq. 3.19 :

$$\begin{aligned}
E_0^{n=0} &= \mathcal{E}_0^\alpha + \langle \Phi_0^\alpha | G_1^\alpha(0) | \Phi_0^\alpha \rangle \\
&= \langle \Phi_0^\alpha | t + G^\alpha(0) | \Phi_0^\alpha \rangle \\
&= \sum_{\alpha_t=1}^N t_{\alpha_t \alpha_t} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha_t, \alpha_{t'}=1}^N \bar{G}_{\alpha_t \alpha_{t'} \alpha_t \alpha_{t'}}^\alpha(0) \quad ,
\end{aligned} \tag{3.22}$$

où $\bar{G}_{\alpha_m \alpha_p \alpha_n \alpha_q}^\alpha(0)$ est un élément de matrice antisymétrisé pris sur couche d'énergie. Nous retrouvons une énergie du type de celle obtenue à l'approximation de champ moyen. Cependant, l'énergie de BHF est signifiante car écrite en terme de la force effective régularisée G^α et non plus en terme de l'interaction singulière V .

La qualité objective de cette approximation est testée par l'évaluation des diagrammes d'ordres supérieurs. À l'ordre suivant, les composantes 2p-2t apparaissent dans la fonction d'onde de l'état fondamental (le fondamental non perturbé ne se couple pas aux états à 1p-1t en raison du choix 3.20 pour le potentiel à un corps) donnant naissance à des diagrammes non nuls à trois lignes de trou dans le calcul de l'énergie. La contribution de ces diagrammes à trois lignes de trou se calcule par la résolution des équations de Bethe-Fadeev [92]. Leur calcul explicite dans la matière nucléaire symétrique [77] ainsi que dans la matière de neutrons [93] a permis de montrer récemment que, tandis que la convergence du développement de Goldstone-Brueckner n'est pas assurée à l'approximation de BHF (même si les ordres de grandeurs sont déjà corrects), elle l'est à l'ordre suivant avec une grande précision. La convergence est notamment caractérisée par l'indépendance de ces résultats vis à vis du potentiel à un corps considéré. Celle-ci est finalement confirmée par le caractère négligeable des termes à quatre lignes de trou [94]. Cependant, ces calculs montrent la nécessité de la prise en compte de forces à trois corps [65] pour reproduire les propriétés de saturation de la matière nucléaire. Enfin, la convergence du développement dans les noyaux finis en fonction de leur masse reste à étudier.

La théorie de perturbation de Goldstone-Brueckner nous fournit donc une justification de la validité de l'image de champ moyen dans le noyau atomique et nous permet de comprendre que celle-ci n'est pas une simple approximation HF.

Les calculs complets de type BHF sont lourds à réaliser en raison du caractère doublement itératif de la méthode lié à la détermination couplée de G^α (Eq. 3.14) et du hamiltonien à un corps caractérisé par le potentiel moyen 3.20. Cette dernière auto-cohérence est classique dans le cadre des méthodes HF tandis que celle liée à la détermination de la force effective est propre à la resommation non-perturbative de Brueckner. Bien que ces calculs microscopiques soient trop lourds pour être réalisés de manière extensive dans les noyaux finis, ils servent de fondement aux calculs utilisant des forces phénoménologiques ajustées sur l'expérience ne conservant plus de lien explicite avec la force nue. Dans ce cas-là, le caractère auto-cohérent de l'interaction se réduit à une éventuelle dépendance dans la densité locale à un corps et le coût numérique, bien que significatif, est largement diminué et autorise des calculs quantitatifs systématiques sur l'ensemble de la table de masse.

Notons que les méthodes du champ moyen auto-cohérent ne sont pas toujours mises en relation, ne serait-ce qu'en principe, avec la théorie de BHF. Parfois, une démarche purement phénoménologique est adoptée ayant pour motivation première de reproduire les données expérimentales. D'autres fois, les calculs de type champ moyen sont justifiés dans le cadre puissant de la théorie de la fonctionnelle de la densité [95, 96] fondée sur le travail de Hohenberg et Kohn [97]. La difficulté avec ces deux dernières interprétations est de maîtriser le niveau d'approximation du problème à N corps auquel on travaille. Comme nous venons de le montrer, toute théorie dite de champ moyen dans le noyau inclue en réalité un certain nombre de corrélations. De fait, il semble important de pouvoir les caractériser, c'est à dire d'explicitier dans quelle mesure l'utilisation de l'espace de Hilbert des fonctions produit s'accompagne d'une renormalisation implicite de corrélations. La théorie de la fonctionnelle de la densité aussi puissante soit-elle ne fournit pas d'information quant à la forme de la fonctionnelle et donc sur le niveau d'approximation du problème à N corps auquel le calcul se situe.

On préférera ici fonder les calculs de type champ moyen sur une théorie *ab initio* telle que la théorie de Goldstone-Brueckner qui permet de le faire, au moins en principe. Cela autorise une hiérarchisation des approximations sur des bases systématiques, utile lorsque la nécessité d'agrandir l'espace de Hilbert pour des calculs au-delà du champ moyen se fait sentir. Evidemment, utiliser cette stratégie ne doit pas être un vœu pieux et doit motiver le plus fortement possible la paramétrisation des forces phénoménologiques utilisées à tel ou tel niveau d'approximation. Beaucoup reste à dire sur ce sujet mais nous reportons la suite de cette discussion à la dernière partie de ce mémoire. Nous passons maintenant à la présentation des méthodes de champ moyen auto-cohérent HF et HFB.

Chapitre 4

Méthodes du champ moyen auto-cohérent.

Etant donnée la justification formelle précédente, le point de départ des calculs de champ moyen correspond à la définition d'un hamiltonien ¹ effectif dépendant a priori de la densité du système étudié :

$$H[\rho] = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl}[\rho] c_i^\dagger c_k^\dagger c_l c_j . \quad (4.1)$$

Dans la suite v désigne la force effective tandis que V la force nue. Les termes *Hartree-Fock* ou *Hartree-Fock-Bogolyubov* utilisés dans la suite doivent être compris comme un abus de langage au regard de la section 3 puisque la sommation des échelles de Brueckner dans l'interaction est supposée réalisée. De plus, nous omettrons, et cela jusqu'à ce que le contraire soit spécifié, le symbole α utilisé jusqu'ici pour rappeler la base propre à un corps du champ moyen considéré. Nous omettrons également l'indice i précisant l'état à N corps étudié s'il est clair qu'il s'agit de l'état fondamental.

4.1 Formalisme Hartree-Fock.

À l'approximation HF, la fonction d'onde d'essai est un déterminant de Slater prenant la forme :

$$|\Phi\rangle = \prod_{\nu=1}^N b_\nu^\dagger \prod_{\pi=1}^Z b_\pi^\dagger |0\rangle = \prod_{k=1}^{\text{"}N\text{'}} b_k^\dagger |0\rangle , \quad (4.2)$$

où N (Z) est le nombre de neutrons (protons) ². La base $\{b_k\}$ est reliée à la base de départ par une transformation unitaire de la forme :

¹Nous reviendrons dans la troisième partie sur ce que nous entendons par *hamiltonien* effectif.

²Nous utiliserons fréquemment la seconde écriture de l'Eq. 4.2 ne spécifiant pas l'isospin des particules. Dans ce contexte, " N " devra être entendu comme le nombre total de particules.

$$b_k^\dagger = \sum_i D_{ik} c_i^\dagger \quad , \quad (4.3)$$

tandis qu'une base $\{\eta_k\}$ de quasi-particules (qp) est définie par :

$$\begin{aligned} \eta_k &= b_k^\dagger = \sum_i D_{ik} c_i^\dagger && \text{si } k \text{ est un état de trou} \quad , \\ \eta_k &= b_k = \sum_i D_{ik}^* c_i && \text{si } k \text{ est un état de particule} \quad , \end{aligned} \quad (4.4)$$

de telle sorte que l'état $|\Phi\rangle$ est le vide de quasi-particule :

$$\eta_k |\Phi\rangle = 0 \quad \forall k \quad . \quad (4.5)$$

Précisons le type de densité utilisée dans le hamiltonien 4.1. Au niveau du champ moyen, le seul choix naturel, justifié à partir de la théorie de Goldstone-Brueckner [66, 67, 98], consiste à prendre une dépendance dans la densité à un corps de l'état de champ moyen $|\Phi\rangle$ que l'on cherche à déterminer. En pratique, la force v dépend de la partie locale scalaire-isoscalaire $\rho_0(\vec{R})$ de la matrice densité de champ moyen (voir Eq. 12.23). Nous reviendrons sur ce point dans la suite.

Écrivons explicitement l'énergie moyenne $\mathcal{E}^{HF}[\rho]$ dans l'état $|\Phi\rangle$ en fonction de la matrice densité à un corps associée, sans utiliser le fait que celle-ci puisse être diagonale :

$$\mathcal{E}^{HF}[\rho] = \frac{\langle \Phi | H[\rho] | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl}[\rho] \rho_{ji} \rho_{lk} \quad . \quad (4.6)$$

La base à un corps $\{b_k\}$ et le hamiltonien à un corps h sont déterminés par minimisation de l'énergie :

$$\delta \mathcal{E}^{HF}[\rho] = 0 \quad , \quad (4.7)$$

ce qui fait de la méthode HF une méthode *variationnelle*. Il faut cependant noter que, l'énergie HF 4.6 étant interprétée comme une approximation de l'énergie de BHF la minimisation 4.7 n'est pas reliée au principe variationnel de Ritz. L'énergie obtenue peut notamment être inférieure à l'énergie du vrai fondamental. La minimisation par rapport à la densité ρ s'écrit :

$$\delta \mathcal{E}^{HF}[\rho] = \sum_{ij} \frac{\partial \mathcal{E}^{HF}[\rho]}{\partial \rho_{ji}} \delta \rho_{ji} = \sum_{ij} h_{ij} \delta \rho_{ji} = 0 \quad , \quad (4.8)$$

où le hamiltonien à un corps a été défini par :

$$h_{ij} = \frac{\partial \mathcal{E}^{HF}[\rho]}{\partial \rho_{ji}} = h_{ji}^* \quad (4.9)$$

$$= t_{ij} + \Gamma_{ij}[\rho] \quad . \quad (4.10)$$

$\Gamma[\rho]$ est le potentiel Hartree-Fock auto-cohérent vu par une particule en raison de l'interaction avec les autres particules. Il a pour expression :

$$\Gamma_{ij}[\rho] = \Gamma_{ij}^{p-t} + \Gamma_{ij}^{p-t[\rho]} \quad , \quad (4.11)$$

$$= \sum_{kl} \bar{v}_{ikjl}[\rho] \rho_{lk} + \frac{1}{2} \sum_{klmn} \left(\frac{\partial v[\rho]}{\partial \rho_{ji}} \right)_{klmn} \rho_{mk} \rho_{nl} \quad . \quad (4.12)$$

Le terme $\Gamma_{ij}^{p-t[\rho]}$ trouve son origine dans la dépendance en densité de la force effective et traduit le fait que l'interaction elle-même change si on ajoute ou enlève un nucléon. Ce terme constitue le *potentiel de réarrangement* et joue un rôle essentiel quant aux propriétés de saturation de la matière nucléaire, à la reproduction des densités dans les noyaux lourds et à l'accord entre les énergies individuelles théoriques et les énergies de séparation [40, 68]. La détermination variationnelle du potentiel à un corps introduit une certaine distanciation vis à vis de la théorie diagrammatique dans laquelle ce principe n'intervient pas. En effet, tandis que le premier terme de l'Eq. 4.11 correspond à la définition de BHF, le potentiel de réarrangement est propre au caractère variationnel de la méthode. Comme discuté dans la section précédente, il est cependant possible de montrer qu'une certaine équivalence existe entre les deux théories lorsqu'un choix particulier de diagrammes est inclu dans la définition du potentiel moyen [68, 88, 84].

La densité à un corps associée à l'état HF vérifie :

$$\rho^2 = \rho \quad , \quad (4.13)$$

ce qui est équivalent au fait que la fonction d'onde correspondante est un déterminant de Slater. Alors, une variation infinitésimale de ρ sous cette contrainte donne au premier ordre en $\delta\rho$:

$$\delta\rho = \rho \delta\rho + \delta\rho \rho \quad , \quad (4.14)$$

ce qui, en se plaçant dans une base qui diagonalise ρ , permet de voir que les seuls éléments de matrice $\langle \phi_i | \delta\rho | \phi_j \rangle$ non nuls sont les éléments p-t. On en déduit que le principe de minimisation 4.8 revient à annuler les éléments de matrice de h correspondants dans une telle base. La base ainsi obtenue étant définie à une transformation unitaire près entre états de particule d'une part et états de trou d'autre part, la base finale $\{b_k\}$ peut être choisie

telle que h soit également diagonal. Les fonctions d'onde individuelles HF permettant de construire l'état fondamental $|\Phi\rangle$ sont donc solutions de l'équation aux valeurs propres :

$$h \phi_i = \epsilon_i \phi_i \quad , \quad (4.15)$$

tandis que l'énergie HF la plus basse s'écrit dans cette base :

$$\mathcal{E}_0^{HF} = \sum_{i=1}^N \epsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \bar{v}_{ijij} [\rho] - \frac{1}{2} \sum_{i,k,l=1}^N \left(\frac{\partial v[\rho]}{\partial \rho_{ii}} \right)_{klkl} . \quad (4.16)$$

Les ϵ_i , $\{i = 1, N\}$, apparaissant dans l'Eq. 4.16 sont les N plus basses énergies propres de h . Nous avons affaire à un processus itératif puisque le hamiltonien h dépend de ρ et donc des fonctions solutions de l'Eq. 4.15. L'énergie HF n'est pas la simple somme des énergies individuelles. L'existence du second terme dans l'Eq. 4.16 est une conséquence de la non-linéarité du problème, tandis que celle du dernier terme est liée à la dépendance de l'interaction dans le milieu.

4.1.1 Symétries et champ moyen.

Nous avons rappelé les invariances du hamiltonien du système dans la section 2.2. Ces invariances se reflètent dans les nombres quantiques des vrais états propres $|\Theta_i\rangle$. En revanche, cela n'est pas nécessairement vrai pour les approximations de ces états. En l'occurrence, les états approchés sont ici déterminés, non pas à partir du vrai hamiltonien H , mais à partir du hamiltonien effectif 4.1 qui ne possèdent pas nécessairement les invariances de H en raison de la dépendance vis à vis de la densité. Malgré tout, il est possible de montrer que si S appartient à un groupe de transformation, il suffit que l'interaction effective $v[\rho]$ soit telle que :

$$Sv[\rho]S^{-1} = v[S\rho S^{-1}] \quad , \quad (4.17)$$

pour que la discussion sur les invariances et les brisures de symétries dans les méthodes de champ moyen ne dépendent pas du caractère effectif de $H[\rho]$ [40]. Nous supposons que tel est le cas dans la discussion ci-dessous.

À l'approximation de champ moyen, le système peut a priori exploiter l'ensemble de l'espace de Hilbert des fonctions produit (déterminants de Slater pour la méthode HF) pour minimiser son énergie. Ainsi, la nature d'une telle méthode d'approximation est d'utiliser un espace variationnel de fonctions simples ne couvrant qu'une faible portion du vrai espace propre, tout en autorisant la fonction d'essai à avoir une composante non nulle dans plusieurs représentations irréductibles du groupe de symétrie de H . Certaines corrélations induites par la force à deux corps peuvent ainsi être incluses dans une approximation de champ moyen auto-cohérent. La prise en compte de ces corrélations se traduit, par exemple, par le fait qu'un déterminant de Slater associé à un champ moyen

déformé s'exprime comme une superposition d'états p-t de moments angulaires différents relativement à un champ sphérique. La méthode du champ moyen auto-cohérent est donc de nature différente d'une *théorie de particules indépendantes* définie par rapport à un hamiltonien à un corps fixe. L'aspect itératif de la méthode conjugué à la recherche du champ moyen le plus général caractérise la stratégie de ces calculs consacrant un effort maximum à l'optimisation de l'ordre zéro (au sens défini dans la section 3.2.5) pour en faire un niveau d'approximation satisfaisant du point de vue de la comparaison à l'expérience.

Les symétries se brisant spontanément à l'approximation de champ moyen (dans l'hypothèse où aucune n'est contrainte par le calcul numérique) dépendent de la nature du hamiltonien (de l'interaction résiduelle) et du système étudié (de la densité d'états individuels au niveau de Fermi). La courte portée de la force nucléaire par exemple favorise la brisure de l'invariance par translation pour tous les noyaux. Cette même courte portée ne favorise la brisure de l'invariance par rotation que pour des noyaux correspondant au remplissage partiel d'une couche de valence sphérique. En effet, les états individuels d'une couche sphérique associée à moment angulaire non nul ne sont pas invariants sous rotation³. À partir du moment où une telle couche n'est remplie que partiellement, la courte portée de l'interaction résiduelle dans le canal p-t favorise le remplissage des états individuels de même déformation et engendre des corrélations à longue portée se traduisant par la déformation du champ moyen dans un processus auto-cohérent. À l'inverse, si une telle couche est entièrement remplie, aucune orientation n'est favorisée dans le processus de minimisation de l'énergie et le noyau reste sphérique.

Plus concrètement, la brisure de symétrie de translation donne naissance au champ Γ sphérique localisé dans l'espace. Ensuite, la brisure de symétrie de rotation pour les noyaux à couche ouverte induit une déformation du champ Γ ; celui-ci conservant ou non un axe de symétrie. Finalement, le système pourra briser l'invariance par renversement du temps. Cela se produit par exemple dans le cas des noyaux impairs et/ou des noyaux en rotation.

Il est à noter que les brisures de symétries s'accompagnent d'une labélisation toujours plus restreinte des états individuels. En d'autres termes, les états propres du champ HF s'écrivent comme des combinaisons linéaires d'états appartenant à différentes représentations irréductibles du groupe de transformation associé à la symétrie brisée. Il faudra donc procéder à une caractérisation adaptée des états individuels en fonction des invariances conservées par le système. Cette caractérisation est présentée dans l'annexe B pour les différents cas qui nous intéresseront dans ce travail.

Les brisures de symétries ne sont pas seulement utiles pour inclure à moindre frais un certain nombre de corrélations dans l'ordre le plus bas de la théorie (cela est relié à l'optimisation du choix du potentiel à un corps dans la théorie de perturbation). Elles le sont également pour identifier l'existence et la nature des modes collectifs de basse énergie. En effets, les corrélations associées à ces brisures dans l'état fondamental sont caractéristiques des modes selon lesquels le système sera le plus facilement excité. Par exemple, un noyau dont l'état fondamental se déforme spontanément à l'approximation de champ moyen présentera des excitations collectives rotationnelles.

Les brisures de symétries doivent être restaurées dans une version plus élaborée et

³Une couche sphérique de $j \neq 0$ correspond à une représentation irréductible multi-dimensionnelle du groupe des rotations dont chaque élément ne peut-être invariant sous tous les éléments du groupe.

aboutie des calculs. Cette restauration est nécessaire pour deux raisons. S'il est vrai que le bénéfice d'une brisure de symétrie quant à la reproduction de l'énergie vraie est d'autant plus important que cette brisure est forte, cela n'est pas le cas pour la fonction d'onde. En effet, la fonction d'onde associée à un champ moyen déformé ne décrit que la composante attachée à un repère intrinsèque de telle sorte que les observables sensibles à la structure de la fonction d'onde sont d'autant plus mal décrites dans le repère du laboratoire [40]. D'autre part, les systèmes présentant des brisures faibles sont particulièrement mal décrits au niveau de champ moyen, que ce soit pour l'énergie ou la fonction d'onde. Ceux-ci nécessitent d'entrée de jeu la restauration des symétries brisées. Nous présenterons la méthode de *Champ Moyen Projeté* autorisant ces restaurations dans la troisième partie du mémoire. Afin de hiérarchiser les différents niveaux d'approximation et d'obtenir la même justification formelle que pour les méthodes de champ moyen auto-cohérent, nous tenterons de relier ces calculs à l'énergie vraie. Cela nécessitera la reformulation des calculs de champ moyen projeté dans un cadre perturbatif, ce qui sera rendu possible grâce à la dérivation d'une théorie de perturbation étendue de Goldstone-Brueckner.

4.1.2 Calculs HF contraints.

Afin d'appréhender la tendance d'un système à briser une symétrie du hamiltonien, on procède à un calcul HF *contraint* sur une coordonnée de déformation. Les autres paramètres définissant l'état du système sont laissés libres dans le processus de minimisation de l'énergie. Concrètement, cela consiste à modifier l'Eq. 4.6 pour y ajouter un terme de contrainte $-\lambda_{\langle Q \rangle} \langle \Phi | Q | \Phi \rangle$ sur la valeur moyenne de l'opérateur Q associé à la déformation étudiée. Dans ce terme, $\lambda_{\langle Q \rangle}$ désigne le paramètre de Lagrange permettant de fixer la valeur de la contrainte au cours du processus de minimisation. L'allure de l'énergie du système en fonction de la valeur de cette contrainte donne une mesure de la raideur du système vis à vis de la brisure de symétrie, tandis que l'apparition d'une brisure se traduira par l'obtention d'un minimum absolu pour une valeur non-nulle de la contrainte.

Les calculs de champ moyen auto-cohérent contraint concernent le plus souvent les déformations spatiales (opérateur quadrupolaire axial Q_{20} , octupolaire axial Q_{30} , ...) mais peuvent également porter sur le nombre de nucléons.

4.1.3 Noyau pair-pair.

Précisons la méthode HF dans le cas des noyaux pair-pair. En accord avec les définitions données dans l'annexe B, les états individuels HF peuvent ici être caractérisés par les nombres quantiques $l \equiv (N, \pi, \zeta_z, t)$, voir $l \equiv (N, \pi, m_z, t)$ si la symétrie axiale est conservée. Dans ces notations, N est un nombre quantique principal, $\pi = \pm 1$ est la parité, $\zeta_z = \pm 1$ est la z-signature (m_z est la projection du moment angulaire total sur l'axe de symétrie) et $t = \pm 1/2$ est l'isospin. L'invariance par renversement du temps d'un système pair-pair permet de les grouper par paire d'états dégénérés (l, \bar{l}) de signature opposée et conjugués par l'opération de renversement du temps :

$$b_l^\dagger = K b_{\bar{l}}^\dagger K^\dagger \quad , \quad (4.18)$$

où par convention $l = (N, \pi, \zeta_z = +1, t)$ et $\bar{l} = (N, \pi, \zeta_z = -1, t)$. L'état HF défini par l'Eq. 4.2 se précise alors sous la forme :

$$|\Phi\rangle = \prod_{l=1}^{N/2} b_l^\dagger b_{\bar{l}}^\dagger |0\rangle, \quad (4.19)$$

$$h|\phi_l\rangle = \epsilon_l |\phi_l\rangle,$$

avec $\epsilon_l = \epsilon_{\bar{l}}$.

4.1.4 Noyau pair-impair.

Dans le cas des noyaux pair-impair (ou impair-impair par extension), la caractérisation des états individuels par le nombre quantique ζ_z et leur groupement par paires (l, \bar{l}) est toujours possible. Cependant, ces états ne sont plus dégénérés en énergie et ne sont plus associés par l'opération de renversement du temps du fait du remplissage asymétrique d'une de ces paires au niveau de Fermi. Comme nous le verrons par la suite, les termes impairs sous renversement du temps sont enclenchés dans ce cas dans la fonctionnelle de l'énergie et jouent un rôle non-négligeable dans la structure de ces noyaux. Le noyau pair-impair adjacent au noyau décrit par la fonction d'onde 4.19 sera représenté par un état HF de la forme :

$$|\tilde{\Phi}_n\rangle = \tilde{b}_n^\dagger \prod_{l=1}^{n-1=N/2} \tilde{b}_l^\dagger \tilde{b}_{\bar{l}}^\dagger |0\rangle, \quad (4.20)$$

$$\tilde{h}|\tilde{\phi}_l\rangle = \tilde{\epsilon}_l |\tilde{\phi}_l\rangle,$$

où le hamiltonien à un corps \tilde{h} défini en utilisant la densité à un corps associée à l'état 4.20 brise l'invariance par renversement du temps de telle sorte que $\tilde{\epsilon}_l \neq \tilde{\epsilon}_{\bar{l}}$. Nous reviendrons plus en détails par la suite sur les propriétés respectives des noyaux pairs et impairs ainsi que sur le schéma permettant de comprendre le lien entre les descriptions auto-cohérentes de ces deux types de noyaux.

4.1.5 Interaction résiduelle.

La méthode HF fournit une bonne approximation de l'état fondamental d'un noyau lorsque son spectre individuel déduit de l'eq. 4.15 présente un large gap en énergie pour le remplissage correspondant de neutrons et de protons. Les excitations élémentaires construites à partir de la fonction HF de l'état fondamental correspondent à la promotion d'une particule depuis un état occupé vers un état vide autour du niveau de Fermi. L'énergie d'excitation d'une telle configuration est d'autant plus importante que le gap dans le spectre individuel autour du niveau de Fermi est grand. C'est le cas des noyaux

magiques. Dans un tel cas, l'interaction résiduelle négligée à l'approximation de champ moyen, ne couplera pas significativement l'état fondamental HF aux premières excitations et celui-ci sera une bonne approximation du vrai fondamental du noyau. Dans le cas contraire où le gap est petit, comme pour les noyaux à couche(s) ouverte(s), l'état fondamental HF est quasi dégénéré avec un certain nombre d'excitations p-t qui lui seront fortement couplées par l'interaction résiduelle. L'approximation HF est alors bien moins adaptée, et il devient nécessaire d'aller un cran plus loin au moyen de la prise en compte de tout ou partie de l'interaction résiduelle.

Au-delà de ces arguments formels, nombre d'observables expérimentales ne sont pas reproductibles pour les noyaux à couche ouverte au moyen d'une théorie HF. De telles propriétés (oscillation pair-impair de l'énergie de liaison, présence et absence d'un gap dans le spectre d'excitations individuelles des noyaux pairs et impairs respectivement, spin 0^+ de tous les noyaux pair-pair, moments d'inertie plus petits que le corps rigide HF et croissant avec la vitesse de rotation ...) laissent à penser que l'interaction résiduelle engendre principalement un *appariement* des nucléons dans des états de spins opposés [40].

Il est possible de tenir compte de ces corrélations d'appariement tout en conservant la simplicité du champ moyen. Il s'agit de la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov qui fait l'objet de la section suivante. L'idée sous-jacente à cette méthode est d'élargir l'espace de configuration, non pas en utilisant un sous-espace plus grand dans l'espace de Hilbert à N particules, mais en ouvrant l'espace vectoriel des fonctions produit à l'espace de Fock tout entier. Cela est en contradiction avec l'idée que l'on se fait du noyau comme d'un système où le caractère défini du nombre de ses constituants doit être respecté comme principe premier. De fait, l'ouverture de l'espace variationnel engendre une brisure de symétrie qui devra faire l'objet d'une attention particulière. La première conséquence sera de procéder à une variation sous la contrainte d'avoir au moins le bon nombre de particules en moyenne.

4.2 Formalisme Hartree-Fock-Bogolyubov.

Afin d'inclure les corrélations particule-particule (et trou-trou) selon le principe qui vient d'être évoqué, les Fermions considérés comme indépendants ne sont plus les nucléons habillés, mais des quasi-particules caractérisées par un jeu d'opérateurs à un corps $\{\eta_k\}$ mélangeant les opérateurs de création et d'annihilation de particules $\{c_n, c_n^\dagger\}$. L'hypothèse faite par Bogolyubov [99] consiste à ne retenir que les combinaisons linéaires de la forme :

$$\eta_k = \sum_n (U_{nk}^* c_n + V_{nk}^* c_n^\dagger) \quad (4.21)$$

$$\eta_k^\dagger = \sum_n (V_{nk} c_n + U_{nk} c_n^\dagger) \quad . \quad (4.22)$$

Cette transformation peut être mise sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \eta \\ \eta^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{B}^\dagger \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} \quad . \quad (4.23)$$

La transformation 4.4 caractérisant l'approximation HF est un cas particulier de la transformation 4.23. Les opérateurs de qp doivent satisfaire aux relations d'anti-commutation caractéristiques des opérateurs fermioniques. Ainsi, la matrice de transformation \mathcal{B} est unitaire :

$$\mathcal{B}^\dagger \mathcal{B} = \mathcal{B} \mathcal{B}^\dagger = I, \quad (4.24)$$

ce qui conduit aux relations entre les matrices U et V :

$$U^\dagger U + V^\dagger V = I, \quad UU^\dagger + V^* V^T = I, \quad (4.25)$$

$$U^T V + V^T U = 0, \quad UV^\dagger + V^* U^T = 0. \quad (4.26)$$

L'état fondamental du système $|\Phi\rangle$ est défini par :

$$|\Phi\rangle = \prod_\nu \eta_\nu \prod_\pi \eta_\pi |0\rangle = \prod_k \eta_k |0\rangle \quad (4.27)$$

et vérifie $\eta_k |\Phi\rangle = 0$ pour tous k . Il s'agit du vide de qp. Comme dans la méthode HF, on écrit l'énergie moyenne de cet état :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{HFB}[\rho]' &= \frac{\langle \Phi | H'[\rho] | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \\ &= \sum_{ij} (t_{ij} - \lambda_\tau) \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl}[\rho] \rho_{ji} \rho_{lk} + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl}[\rho] \kappa_{ik}^* \kappa_{jl} \quad . \end{aligned} \quad (4.28)$$

où :

$$\rho_{ji} = \frac{\langle \Phi | c_i^\dagger c_j | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = (V^* V^T)_{ji}, \quad \kappa_{jl} = \frac{\langle \Phi | c_l c_j | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = (V^* U^T)_{jl}. \quad (4.29)$$

sont respectivement la matrice densité à un corps et la *densité anormale* (*tenseur d'appariement*) de l'état HFB. Le tenseur d'appariement est antisymétrique ($\kappa^T = -\kappa$). La valeur moyenne 4.28 est associée à l'opérateur $H' = H - \lambda_N N - \lambda_Z Z$ traduisant le fait que la minimisation de l'énergie se fait sous les contraintes :

$$\langle \Phi | N | \Phi \rangle = N, \quad \langle \Phi | Z | \Phi \rangle = Z, \quad (4.30)$$

assurant un bon nombre de nucléons en moyenne dans l'état $|\Phi\rangle$. Cette minimisation de l'énergie 4.28 se fait par rapport à ρ et κ et prend la forme d'un problème aux valeurs propres [40] :

$$\begin{pmatrix} h' & \Delta \\ -\Delta^* & -h'^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U^\mu \\ V^\mu \end{pmatrix} = E_\mu \begin{pmatrix} U^\mu \\ V^\mu \end{pmatrix} , \quad (4.31)$$

où les E_μ sont les énergies propres de qp et les matrices colonnes U^μ et V^μ déterminent les états de qp correspondants selon la transformation 4.23. Si l'on utilise une base à un corps de dimension m , la diagonalisation précédente fournit $2m$ valeurs propres et vecteurs propres. Il est possible de montrer que les valeurs propres se répartissent en m valeurs positives $\{E_\mu; (U^\mu, V^\mu)\}$ et m valeurs négatives opposées $\{-E_\mu; (V^{\mu*}, U^{\mu*})\}$. Il faut en sélectionner m afin de construire le jeu de qp associé à l'état étudié avec l'interdiction d'en choisir deux opposées en même temps (condition nécessaire pour satisfaire les relations de commutation fermioniques 4.24). L'énergie la plus basse est obtenue à chaque itération en prenant les m valeurs de qp positives. Ainsi, les excitations de qp associées seront plus hautes en énergie que le fondamental que l'on calcule.

Il est possible de montrer que le spectre de qp est entièrement continu si $\lambda > 0$, tandis qu'il est en partie discret ($|E_\mu| < -\lambda$) et en partie continu ($|E_\mu| > -\lambda$) si $\lambda < 0$. Ainsi, lorsque l'on se rapproche de la drip-line ($\lambda \rightarrow 0$), le spectre devient davantage continu, traduisant le couplage de plus en plus important avec le continuum induit par la force d'appariement. Les propriétés du spectre de qps sont illustrées sur la Fig. 4.1.

La matrice que l'on diagonalise dans l'Eq. 4.31 est la *matrice HFB*. Elle implique le potentiel Hartree-Fock Γ défini par l'intermédiaire du hamiltonien à un corps h' :

$$h'_{ij} = \frac{\partial \mathcal{E}^{HFB}[\rho]'}{\partial \rho_{ji}} = t_{ij} - \lambda + \Gamma_{ij} , \quad (4.32)$$

avec

$$\begin{aligned} \Gamma_{ij} &= \Gamma_{ij}^{p-t} + \Gamma_{ij}^{p-t, [\rho]} + \Gamma_{ij}^{p-p, [\rho]} \\ &= \sum_{kl} \bar{v}_{ijkl}[\rho] \rho_{lk} + \frac{1}{2} \sum_{klmn} \left(\frac{\partial v[\rho]}{\partial \rho_{ji}} \right)_{mknl} \rho_{nm} \rho_{lk} + \frac{1}{4} \sum_{klmn} \left(\frac{\partial v[\rho]}{\partial \rho_{ji}} \right)_{mknl} \kappa_{mk}^* \kappa_{nl} , \end{aligned} \quad (4.33)$$

et le *champ d'appariement* Δ défini par :

$$\Delta_{ij} = \frac{\partial \mathcal{E}^{HFB}[\rho]'}{\partial \kappa_{ij}^*} = \frac{1}{2} \sum_{kl} \bar{v}_{ijkl}[\rho] \kappa_{kl} = -\Delta_{ji} . \quad (4.34)$$

Dans l'Eq. 4.32, le paramètre de Lagrange λ est le potentiel chimique neutron ou proton selon que le champ h' se rapporte aux neutrons ou aux protons (ce dernier est pris diagonal en isospin dans notre présentation). Le champ Hartree-Fock contient un terme additionnel $\Gamma^{p-p, [\rho]}$ par rapport à sa définition dans la théorie HF. Ce terme provient de la dépendance en densité de la force effective, mais contrairement au terme $\Gamma^{p-t, [\rho]}$, il est associé à l'existence du *tenseur d'appariement* κ qui provient des contractions de type particule-particule $\langle cc \rangle$, non nulles au niveau HFB. Ce terme est omis dans quasiment tous les calculs⁴. Cependant, la possibilité qu'il joue un rôle important dans l'oscillation

⁴Il n'est pas pris en compte dans les calculs dont les résultats seront présentés dans ce mémoire.

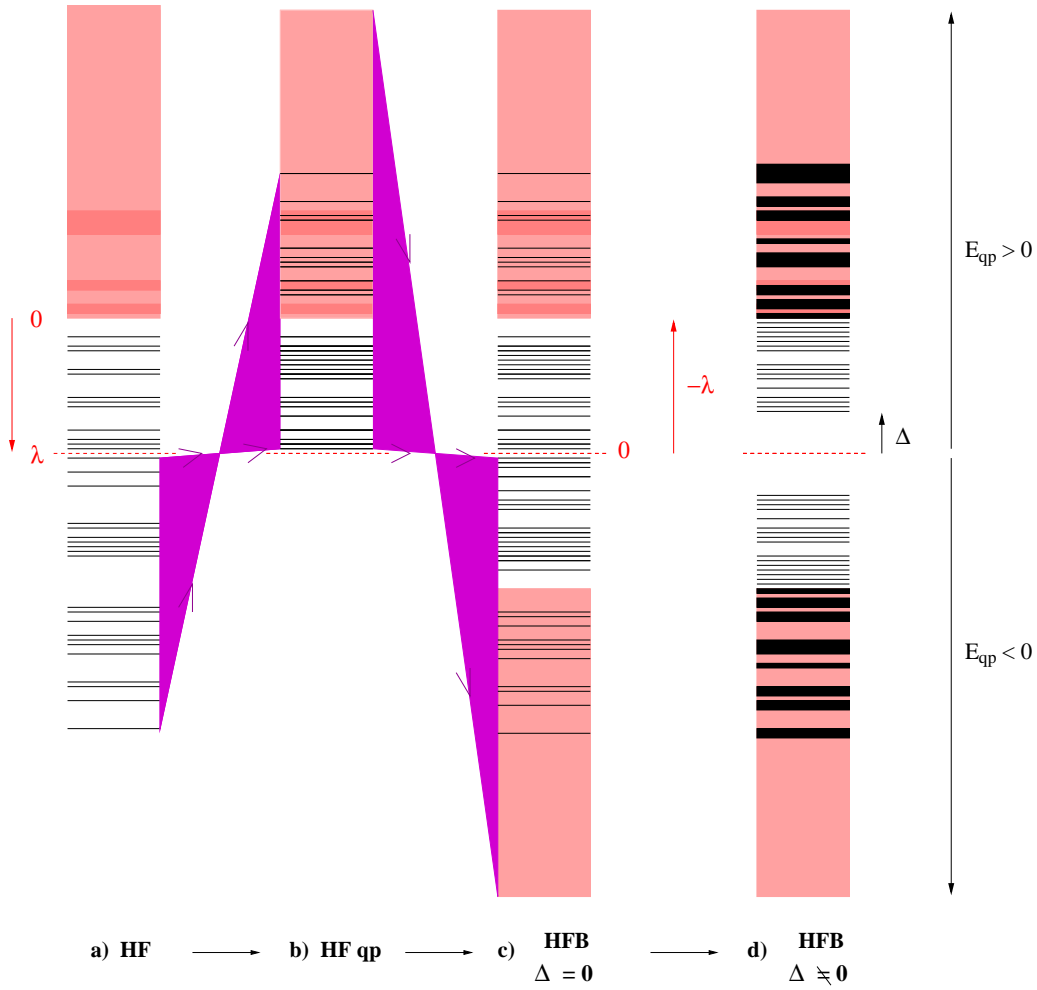


FIG. 4.1 – a) Spectre discret (états liés en noir) et continu (états non-liés en rose) de particules indépendantes HF ϵ_k . Les résonances à une particule sont représentées avec leur largeur sur le fond continu. b) Spectre de qps associé à cet état HF. Ce spectre correspond à $|\epsilon_k - \lambda|$. On trouve des résonances de largeur nulle sur le fond continu issues des états du fond du puit nucléaire dans le spectre HF. c) Spectre de qps pour un appariement nul dans la théorie HFB où la taille de la base est doublée. Ce spectre correspond à $\pm|\epsilon_k - \lambda|$. d) Spectre de qps dans le cas de contractions anormales non-nulles. Le spectre est toujours doublé en $\pm|E_k|$. Les résonances issues du fond du puit ont acquis une largeur du fait de leur couplage avec le fond continu par l'intermédiaire de l'interaction résiduelle d'appariement. Le spectre présente un gap traduisant l'appariement des nucléons deux à deux.

pair-impair des rayons carrés moyens a été avancée dernièrement dans le cadre d'études fondées sur l'utilisation de la fonctionnelle de la densité [100]. La fonctionnelle utilisée dans ces calculs étant beaucoup plus complexe que celles dérivées de forces à deux corps, l'éventualité que l'effet soit pour partie dû à des corrélations au-delà de ce que nous avons défini comme le champ moyen reste envisageable. Malgré tout, ces résultats suggèrent la prise en compte de ce terme dans les calculs de champ moyen auto-cohérent.

Le système d'équations 4.31/4.34 est de nouveau un problème aux valeurs propres non-linéaire qui peut être résolu par itération en se donnant un jeu de fonctions d'onde individuelles et une transformation de Bogolyubov à la première itération. Une fois les états de qps déterminés, la densité ρ et le tenseur d'appariement κ du fondamental sont calculés grâce aux Eq. 4.29, tandis que l'énergie se déduit de l'Eq. 4.28.

4.2.1 Symétries et champ moyen.

La simplicité de la prise en compte des corrélations d'appariement dans la théorie de champ moyen HFB se traduit par l'abandon d'une quantité conservée dans le système, ou autrement dit par l'apparition d'une brisure spontanée de symétrie. Au même titre que l'apparition du champ Γ (non-sphérique) dans la théorie HF caractérise la brisure spontanée de la symétrie de translation (rotation), la violation du bon nombre de nucléons engendre l'apparition du champ Δ . L'intensité de cette violation dépend des caractéristiques de l'interaction résiduelle dans le canal p-p et de la densité d'états individuels au niveau de Fermi pour le système considéré. Nous étudierons la restauration liée à cette brisure de symétrie dans la troisième partie du mémoire.

4.2.2 La base canonique.

Plutôt que de passer directement d'une base quelconque $\{c_k\}$ à la base de qp $\{\eta_k\}$ qui diagonalise \mathcal{H} , il est possible de choisir une base intermédiaire à un corps $\{a_k\}$ qui diagonalise la matrice densité à un corps ρ et met le tenseur κ sous sa forme canonique [40]. Il s'agit de la *base canonique*. Le choix de celle-ci se traduit par une écriture simple du problème HFB. Les densités normale et anormale sont diagonales par blocs de dimension deux, indicées l relativement aux paires d'états conjugués (l, \bar{l}) . Ces blocs 2*2 prennent la forme :

$$\rho^l = \begin{pmatrix} \frac{\langle \Phi | a_l^\dagger a_l | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} & \frac{\langle \Phi | a_l^\dagger a_{\bar{l}} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \\ \frac{\langle \Phi | a_{\bar{l}}^\dagger a_l | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} & \frac{\langle \Phi | a_{\bar{l}}^\dagger a_{\bar{l}} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_l^2 & 0 \\ 0 & v_{\bar{l}}^2 \end{pmatrix} , \quad \kappa^l = \begin{pmatrix} 0 & u_l v_l \\ -u_l v_l & 0 \end{pmatrix} \quad (4.35)$$

avec

$$\begin{bmatrix} u_l^2 \\ v_l^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{\bar{l}}^2 \\ v_{\bar{l}}^2 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\frac{1}{2}(h'_{ll} + h'_{\bar{l}\bar{l}})}{\sqrt{\frac{1}{4}(h'_{ll} + h'_{\bar{l}\bar{l}})^2 + \Delta_{\bar{l}l}^2}} \right] , \quad (4.36)$$

où h'_{ll} , $h'_{\bar{l}\bar{l}}$ et $\Delta_{\bar{l}l}$ sont des éléments de matrice des champs h' et Δ dans la base canonique. La conjugaison des états (l, \bar{l}) est déterminée par le principe de minimisation du problème HFB traité. Le passage à cette base sera noté :

$$a_l^\dagger = \sum_l D_{kl} c_k^\dagger \quad . \quad (4.37)$$

La fonction d'onde HFB 4.27 de l'état fondamental du système s'écrit alors :

$$|\Phi\rangle = \prod_{l>0} \left(u_l + v_l a_l^\dagger a_{\bar{l}}^\dagger \right) |0\rangle \quad , \quad (4.38)$$

et peut être vu comme un vide pour le jeu de qps :

$$\gamma_l^\dagger = u_l a_l^\dagger - v_l a_{\bar{l}} \quad (4.39)$$

$$\gamma_{\bar{l}}^\dagger = u_l a_{\bar{l}}^\dagger + v_l a_l \quad . \quad (4.40)$$

La définition de la base canonique permet finalement d'expliciter le théorème de Bloch-Messiah [101] stipulant la possible décomposition de la transformation de Bogolyubov 4.23 en un produit de trois transformations de forme particulière :

$$\mathcal{B} = \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & D^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u & v \\ v & u \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C & 0 \\ 0 & C^* \end{pmatrix} \quad , \quad (4.41)$$

la dernière transformation permettant de passer simplement de la base $\{\gamma_l\}$ à la base propre $\{\eta_k\}$ du problème HFB.

4.2.3 Approximation BCS.

Un cas particulier du problème HFB a lieu lorsque la dernière transformation C de l'Eq. 4.41 est triviale, c'est à dire lorsque la base de qp $\{\gamma_k\}$ diagonalise la matrice HFB. Dans ce cas, seuls les éléments de matrice du champ d'appariement de type $\Delta_{l\bar{l}}$ sont non-nuls dans la base canonique, tandis que le hamiltonien h est diagonal. Les énergies de qp solutions de l'Eq. 4.23 prennent la forme simple :

$$E_l = E_{\bar{l}} = \sqrt{(h'_{ll})^2 + \Delta_{l\bar{l}}^2} = \sqrt{(\epsilon_l - \lambda)^2 + \Delta_{l\bar{l}}^2} \quad , \quad (4.42)$$

tandis que l'équation du gap BCS s'écrit :

$$\Delta_{l\bar{l}} = -\frac{1}{2} \sum_{k>0} \bar{v}_{l\bar{l}k\bar{k}} [\rho] \frac{\Delta_{k\bar{k}}}{E_k} \quad , \quad (4.43)$$

En principe, la validité de ce schéma particulier ne peut être constaté qu'a posteriori. L'approximation de *Bardeen-Cooper-Schrieffer* (BCS) consiste à la considérer comme

vérifiée a priori pour le système étudié. Selon cette hypothèse, les états de la base canonique sont déterminés par la résolution du problème HF tandis que l'on requiert du champ d'appariement qu'il ne couple que les états l et \bar{l} . Cela est justifié dans l'étude de l'état fondamental des noyaux pair-pair, où les états HF dégénérés (l, \bar{l}) joints par l'opération de renversement du temps 4.18 sont les seuls couplés par une force standard d'appariement monopolaire. Cette approximation n'est pas justifiée pour l'étude des noyaux pair-pair proches de la drip-line qui requièrent l'utilisation de la méthode HFB complète. La solution BCS présente dans ce cas une pathologie liée au couplage au continuum induit par la force résiduelle d'appariement. La solution trouvée n'est plus localisée dans l'espace et correspond à un noyau entouré d'un gaz de particules [102]. L'approximation BCS n'est pas non plus adaptée au calcul des états rotationnels par la méthode de cranking ou pour le calcul des noyaux impairs en raison de la brisure de l'invariance par renversement du temps qui lève la dégénérescence de Kramers entre états HF renversés du temps et qui met en défaut le choix d'apparier ces états a priori. La transformation de Bogolyubov complète doit être réalisée pour déterminer les états appariés.

4.2.4 Noyau pair-pair.

La théorie HFB telle que nous l'avons dérivée est adaptée à la description des noyaux pair-pair. En effet, il est aisé de constater que la fonction d'onde 4.38 écrite dans la base canonique est une superposition d'états ayant un nombre pair de neutrons et de protons. On dit que le nombre quantique de *nombre parité* est pair [103]. Cela montre que si aucune propriété particulière n'est imposée à la transformation de Bogolyubov 4.23, l'énergie la plus basse est automatiquement obtenue pour un état totalement apparié ayant un nombre parité pair, que le nombre moyen de particules requis dans le calcul soit pair ou impair. Cela n'est pas surprenant puisque l'appariement est d'autant plus liant qu'il peut associer les nucléons deux à deux dans toutes les composantes de la fonction d'onde HFB.

Étant données les propriétés d'invariance de l'état fondamental d'un noyau pair-pair, la fonction d'onde HFB d'un tel système se précise sous la forme :

$$|\Phi\rangle = \prod_{l>0} \eta_l \eta_{\bar{l}} |0\rangle \quad , \quad (4.44)$$

où (l, \bar{l}) sont associés par l'opération de renversement du temps 4.18. Le spectre de quasi-particules est doublement dégénéré en (l, \bar{l}) comme exprimé par l'Eq. 4.42.

4.2.5 Noyau pair-impair.

La théorie HFB est tout aussi adaptée à la description des noyaux pair-impair ou impair-impair qu'à la description des noyaux pair-pair. Il est cependant nécessaire d'imposer des contraintes physiques à l'élargissement de l'espace variationnel relativement à la théorie HF si nous ne voulons pas trop nous éloigner de l'état à N corps dont on cherche une approximation.

En effet, les états propres du hamiltonien 4.1 pour un noyau ayant un nombre impair de nucléons appartiennent naturellement au sous espace de Fock des états ayant ce nombre

de particules. Il est naturel de penser, bien que rien ne le prouve a priori, qu'une meilleure approximation du vrai état fondamental du système impair sera obtenue si la fonction d'onde HFB possède une composante non nulle dans ce sous espace. Tel sera le cas si l'on impose à la fonction 4.27 d'être une superposition d'états ayant un nombre impair de nucléons, c'est à dire ayant un nombre parité impair. Cette contrainte améliore la description quantitative des noyaux impairs puisqu'en plus d'obtenir une fonction d'onde "piquée" dans le bon sous-espace propre de N , elle permet de rendre compte de deux caractéristiques essentielles de la structure des noyaux impairs qu'il est impossible de décrire au moyen d'un état de nombre parité pair. Il s'agit de l'effet dit de blocage de l'appariement lié à la présence du nucléon impair et de la brisure de l'invariance par renversement du temps également provoquée par lui. Nous reviendrons en détails sur ces effets.

Afin d'imposer un nombre parité impair à la fonction d'onde, la fonction d'essai est écrite :

$$|\tilde{\Phi}_n\rangle = \bar{\eta}_n^\dagger |\Phi\rangle = \bar{\eta}_n^\dagger \prod_{l>0} \bar{\eta}_l \bar{\eta}_{\bar{l}} |0\rangle \quad , \quad (4.45)$$

où $|\bar{\Phi}\rangle$ possède un nombre parité pair. On dit que $|\tilde{\Phi}_n\rangle$ est un état à une qp sur le vide totalement apparié. On peut aisément vérifier que cette fonction est un vide pour le jeu de qp $\{\tilde{\eta}\} = \{\dots, \bar{\eta}_j, \dots, \bar{\eta}_n^\dagger, \dots\}$ et que cela revient à définir les matrices (\tilde{U}, \tilde{V}) en échangeant les colonnes indicées n dans les matrices (\bar{U}, \bar{V}) avec les colonnes correspondantes des matrices (\bar{V}^*, \bar{U}^*) :

$$(U_{in}, V_{in}) \longleftrightarrow (V_{in}^*, U_{in}^*) \quad , \quad (4.46)$$

(\bar{U}, \bar{V}) caractérisant la transformation de Bogolyubov pour l'état $|\bar{\Phi}\rangle$. La généralisation aux états à plusieurs qps se fait immédiatement en considérant l'échange des colonnes appropriées dans les matrices (\bar{U}, \bar{V}) et (\bar{V}^*, \bar{U}^*) ⁵. Chacun de ces états peut alors être vu comme un vide pour le jeu de qp approprié.

Finalement, de la même manière que pour les états de nombre parité pair, le jeu de qp $\{\tilde{\eta}\}$ est déterminé par minimisation de l'énergie :

$$\delta \frac{\langle \tilde{\Phi}_n | H'[\rho] | \tilde{\Phi}_n \rangle}{\langle \tilde{\Phi}_n | \tilde{\Phi}_n \rangle} = 0 \quad (4.47)$$

sous les contraintes :

$$\langle \tilde{\Phi}_n | N | \tilde{\Phi}_n \rangle = N \quad , \quad \langle \tilde{\Phi}_n | Z | \tilde{\Phi}_n \rangle = Z \quad , \quad (4.48)$$

⁵L'espace des états de nombre parité pair sera engendré par toutes les combinaisons d'un nombre pair de tels échanges par rapport au vide totalement apparié, tandis que l'espace des états de nombre parité impair sera engendré par toutes les combinaisons d'un nombre impair de ces échanges.

avec Z pair et N impair par exemple. Cette minimisation se traduit par un problème aux valeurs propres formellement identique à l'Eq. 4.31 :

$$\begin{pmatrix} \tilde{h}' & \tilde{\Delta} \\ -\tilde{\Delta}^* & -\tilde{h}'^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{U}^\mu \\ \tilde{V}^\mu \end{pmatrix} = \tilde{E}_\mu \begin{pmatrix} \tilde{U}^\mu \\ \tilde{V}^\mu \end{pmatrix} , \quad (4.49)$$

où les champs \tilde{h}' , $\tilde{\Gamma}$ et $\tilde{\Delta}$ sont construits selon les formules 4.32, 4.33 et 4.34 en utilisant les densités normale $\tilde{\rho}$ et anormale $\tilde{\kappa}$ définies par :

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{ji} &= \langle \tilde{\Phi}_n | c_i^\dagger c_j | \tilde{\Phi}_n \rangle = \bar{\rho}_{ji} - (\bar{V}_{jn}^* \bar{V}_{in} - \bar{U}_{jn} \bar{U}_{in}^*) , \\ \tilde{\kappa}_{jl} &= \langle \tilde{\Phi}_n | c_l c_j | \tilde{\Phi}_n \rangle = \bar{\kappa}_{jl} - (\bar{V}_{jn}^* \bar{U}_{ln} - \bar{U}_{jn} \bar{V}_{ln}^*) , \end{aligned} \quad (4.50)$$

$\bar{\rho}$ et $\bar{\kappa}$ étant les densités de l'état totalement apparié correspondant. Les énergies de qp obtenues par la diagonalisation vérifient les mêmes propriétés que celles énoncées dans la présentation générale, sauf que parmi les deux qps de plus basse énergie absolue, celle correspondant à la valeur négative est sélectionnée à chaque itération pour construire le jeu de qp associé à l'état $|\tilde{\Phi}_n\rangle$. De plus, la brisure de l'invariance par renversement du temps dans ces systèmes lève la dégénérescence des énergies de qp \tilde{E}_l et $\tilde{E}_{\bar{l}}$. Les densités $\tilde{\rho}$ et $\tilde{\kappa}$ dépendent explicitement de n et l'équation aux valeurs propres 4.49 devra être résolue indépendamment pour chaque qp. L'état fondamental du noyau impair noté jusqu'ici $|\tilde{\Phi}_n\rangle$ doit être entendu comme l'état $|\tilde{\Phi}_k\rangle$ de plus basse énergie. Les autres états $|\tilde{\Phi}_k\rangle$ seront associés à des excitations individuelles.

Finalement, la fonction HFB définie par l'Eq. 4.45 s'exprime dans la base canonique sous la forme :

$$|\tilde{\Phi}_n\rangle = \tilde{a}_n^\dagger \prod_{l>0 \neq n} \left(\tilde{u}_l + \tilde{v}_l \tilde{a}_l^\dagger \tilde{a}_l^\dagger \right) |0\rangle , \quad (4.51)$$

ce qui permet de montrer qu'il existe une paire d'états (n, \bar{n}) dans cette base dont les occupations sont :

$$\tilde{v}_n^2 = 1 \quad , \quad \tilde{v}_{\bar{n}}^2 = 0 \quad . \quad (4.52)$$

4.2.6 Interaction résiduelle.

Nous discutons maintenant de la validité de l'approximation HFB pour les noyaux pair-pair et pair-impair. Comme à l'approximation HF, cette validité repose sur le caractère négligeable de l'interaction résiduelle entre le fondamental HFB et les excitations d'un nombre pair de quasi-particules vis à vis de leur écart en énergie.

En ce qui concerne les noyaux pair-pair, le couplage entre le fondamental et tous les états à deux qps est annulé par la minimisation de l'énergie [40]. Les premiers états qui se

couplent à l'état fondamental via l'interaction résiduelle sont les états à quatre qps. Un tel état prend la forme ⁶ :

$$|\Phi\rangle_{n_3 \bar{n}_2 n_1 \bar{n}} = \eta_{n_3}^\dagger \eta_{\bar{n}_2}^\dagger \eta_{n_1}^\dagger \eta_{\bar{n}}^\dagger |\Phi\rangle \quad , \quad (4.53)$$

où $\{\eta_k\}$ est la base de qp déterminée par minimisation de l'énergie de l'état de nombre parité pair le plus bas $|\Phi\rangle$. Pour les états les plus bas en énergie, les qps $(\bar{n}, n_1, \bar{n}_2, n_3)$ sont prises parmi celles ayant les énergies les plus faibles. Leur énergie d'excitation est à l'ordre 1 des perturbations :

$$\Delta E_{4qps} \approx E_{n_3} + E_{\bar{n}_2} + E_{n_1} + E_{\bar{n}} \approx 4 \Delta_{\epsilon_F} \quad , \quad (4.54)$$

où Δ_{ϵ_F} est le gap d'appariement au niveau de Fermi. Il s'agit d'une borne inférieure de l'énergie d'excitation des états à 4 qps dans un état de nombre parité pair.

Afin de juger de la validité de l'approximation HFB pour les noyaux pair-impair, le même type de raisonnement doit être tenu. Rappelons tout d'abord que le jeu de qp $\{\tilde{\eta}_k\}$ associé à l'état $|\tilde{\Phi}_n\rangle$ peut être relié formellement à celui de l'état de nombre parité pair totalement apparié correspondant $|\Phi\rangle$ par :

$$\tilde{\eta}_k^\dagger \Longleftrightarrow \bar{\eta}_k^\dagger \quad , \quad \text{pour } k \neq n \quad , \quad \text{et} \quad \tilde{\eta}_n^\dagger \Longleftrightarrow \bar{\eta}_n \quad , \quad (4.55)$$

ce qui entraîne notamment $\{\tilde{E}_n \leq 0, \tilde{\zeta}_n = -\zeta_n\}$ pour la qp $\tilde{\eta}_n^\dagger$. Cette correspondance existe à chaque étape du processus itératif, mais les énergies de qps sont différentes de celles que l'on aurait obtenues par minimisation de l'état totalement apparié. La minimisation réalisée pour l'état de nombre parité impair entraîne une compression du spectre de qp et la levée de la dégénérescence de Kramers entre états renversés du temps. La compression est liée au processus de blocage de l'appariement dû au nucléon impair célibataire. Celui-ci occupe l'orbite individuelle n avec la probabilité 1 et interdit la diffusion des paires dans les états (n, \bar{n}) , ce qui a pour effet de diminuer l'intensité de l'appariement pour toutes les paires (k, \bar{k}) .

Pour un état impair calculé de manière auto-cohérente selon la méthode présentée dans la section précédente, la minimisation 4.47 annule tous les couplages au premier ordre des perturbations entre le fondamental $|\tilde{\Phi}_n\rangle$ et les états à deux qps sur ce fondamental. Cela inclut l'annulation du couplage avec les états où l'une des qps est $\tilde{\eta}_n^\dagger$:

$$|\tilde{\Phi}_n\rangle_{n_1 n} = \tilde{\eta}_{n_1}^\dagger \tilde{\eta}_n^\dagger |\tilde{\Phi}_n\rangle \quad , \quad (4.56)$$

et où l'autre est telle que $\zeta_{n_1} = \zeta_n$. Ces états ⁷ sont plus bas en énergie que ne le sont les états à deux qps dans un état de nombre parité pair puisque :

⁶Nous ne considérons que les excitations de qps présentant les nombres quantiques que le fondamental. Il faut donc $(\Pi \zeta_z^i = +1, \Pi \pi^i = +)$, voire $(\sum m_z^i = 0, \Pi \pi^i = +)$ si le système est axial.

⁷Comme le fondamental $|\tilde{\Phi}_n\rangle$, ces états correspondent à des états à une qp sur un vide de nombre parité pair.

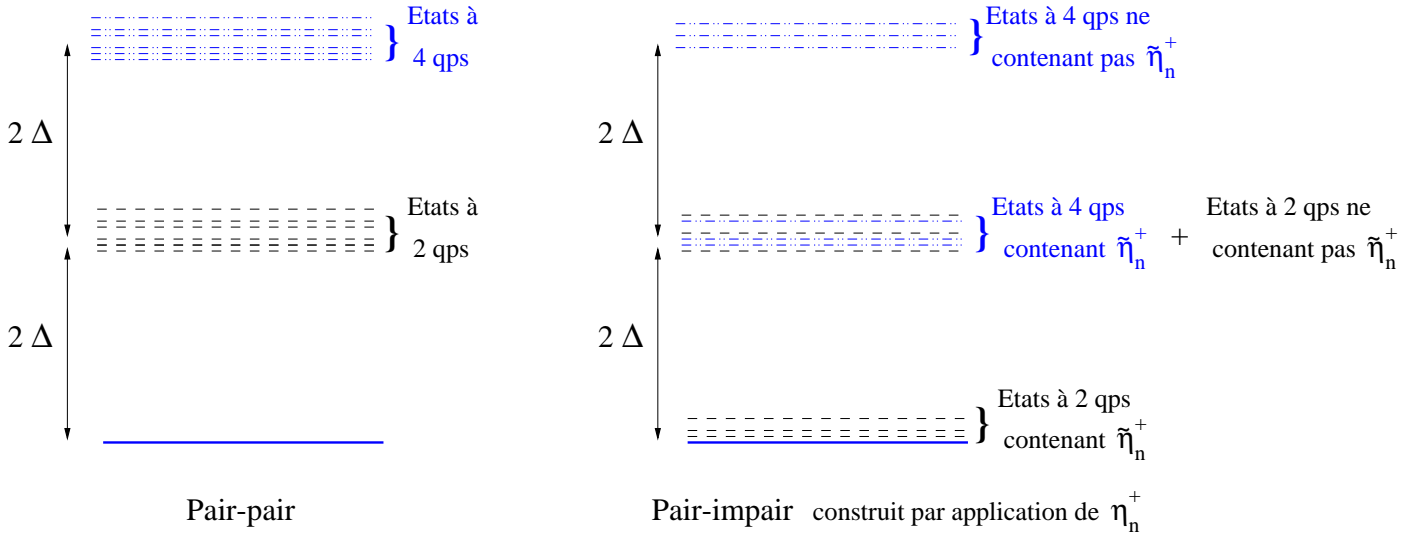


FIG. 4.2 – Excitations individuelles dans un noyau pair-pair et un noyau pair-impair à couche ouverte. Les états en noir ne sont pas couplés au fondamental HFB au premier ordre des perturbations par l’interaction résiduelle.

$$\Delta \tilde{E}_{2qps} = \tilde{E}_{n_1} - |\tilde{E}_n| \approx |\epsilon_{n_1} - \epsilon_n|, \quad (4.57)$$

mais ne sont pas couplés au fondamental par l’interaction résiduelle. De nouveau, les premiers états à se coupler au fondamental via l’interaction résiduelle sont les états à quatre qps. Là encore, il en existe une catégorie particulière faisant intervenir la qp $\tilde{\eta}_n^\dagger$:

$$|\tilde{\Phi}_n\rangle_{n_3 \bar{n}_2 n_1 n} = \tilde{\eta}_{n_3}^\dagger \tilde{\eta}_{\bar{n}_2}^\dagger \tilde{\eta}_{n_1}^\dagger \tilde{\eta}_n^\dagger |\tilde{\Phi}_n\rangle, \quad (4.58)$$

dont l’énergie d’excitation est au minimum :

$$\Delta \tilde{E}_{4qps} = \tilde{E}_{n_3} + \tilde{E}_{\bar{n}_2} + \tilde{E}_{n_1} - |\tilde{E}_n| \approx 2 \tilde{\Delta}_{\epsilon_F}, \quad (4.59)$$

où $\tilde{\Delta}_{\epsilon_F}$ est le “gap d’appariement au niveau de Fermi” dans l’impair (il s’agit d’une moyenne sur les $\tilde{\Delta}_k$ considérés). Cette énergie d’excitation est deux fois plus faible que celle des états à quatre qps ne faisant pas intervenir $\tilde{\eta}_n^\dagger$ ou que celle de tous les états à quatre qps par rapport à un vide de nombre parité pair. Cette situation est représentée schématiquement sur la Fig. 4.2. De tels états sont donc spécifiques au traitement des noyaux impairs et laissent à penser que la prise en compte de l’interaction résiduelle va d’avantage abaisser l’énergie du fondamental impair que celle du fondamental pair. Cependant, l’énergie d’excitation de ces états n’est pas le seul critère important puisque celle-ci doit être mise en perspective avec les éléments de matrice de couplage.

Les éléments de matrice de couplage entre le fondamental pair-pair et les états à 4 qps définis par l’Eq. 4.53 d’une part, et les éléments de matrice de couplage entre le

fondamental pair-impair et les états à 4 qps définis par l'Eq. 4.58 d'autre part, sont calculés dans l'annexe D. Considérons le cas idéal d'un noyau à couche ouverte présentant une forte densité d'états individuels au niveau de Fermi (noyau d'étain à couche ouverte ^{116}Sn par exemple). Nous sélectionnons les états à 4 qps de plus basse énergie vérifiant :

$$u_{n_1} \approx u_{n_2} \approx u_{n_3} \approx u ; v_{n_1} \approx v_{n_2} \approx v_{n_3} \approx v \quad . \quad (4.60)$$

Les éléments de matrice de couplage qui se correspondent dans les noyaux pair-pair (Eq. D.5) et pair-impair (Eq. D.7) prennent respectivement les formes simples :

$$\begin{aligned} {}_{n_3\bar{n}_2n_1\bar{n}}\langle \Phi | H_{40} | \Phi \rangle / I_{nn_1n_2n_3} &= \frac{u v (u + v)}{\sqrt{2}} \\ {}_{n_3\bar{n}_2n_1n}\langle \tilde{\Phi}_n | \tilde{H}_{40} | \tilde{\Phi}_n \rangle / I_{nn_1n_2n_3} &= \frac{u v (u - v)}{\sqrt{2}} \quad , \end{aligned} \quad (4.61)$$

avec

$$I_{nn_1n_2n_3} = \bar{v}_{n_3n_1n_2n} + \bar{v}_{\bar{n}n_3\bar{n}_1n_2} - \bar{v}_{\bar{n}n_1\bar{n}_3n_2} \quad . \quad (4.62)$$

Ces quantités sont tracées sur la Fig. 4.3 en fonction de $\epsilon_{n_i} - \lambda$, c'est à dire en fonction de la position des états quasi-dégénérés ϵ_{n_1} , $\epsilon_{\bar{n}_2}$ et ϵ_{n_3} au voisinage du niveau de Fermi. Cette figure illustre le fait que le couplage au premier ordre des perturbations de l'état fondamental avec les états de plus basse énergie est qualitativement et quantitativement différent dans un noyau pair-pair et dans un noyau pair-impair. Pour la catégorie d'états considérée, le couplage n'a pas la même intensité, voire un signe différent pour les états de trous, dans le pair-pair et dans le pair-impair. En particulier, le couplage avec les états les plus bas, tels que $\epsilon_{n_1} \approx \epsilon_{\bar{n}_2} \approx \epsilon_{n_3} \approx \lambda^8$, est maximal dans un noyau pair-pair alors qu'il est nul dans un noyau pair-impair.

Il est impossible de tirer une conclusion de l'étude de quelques éléments de matrice de couplage dans un problème aux valeurs propres. Malgré tout, la comparaison schématique présentée ici met en doute l'argument généralement avancé [104, 105]⁹ disant que l'approximation HFB est de moins bonne qualité pour les états de nombre parité impair (noyaux impairs) que pour les états de nombre parité pair (noyaux pairs) du fait de la plus basse énergie non perturbée des états se couplant au fondamental impair au premier ordre des perturbations. En effet, le comportement des éléments de matrice de couplage semble pouvoir aller dans le sens opposé. Notons que l'argument précédent a été à l'origine de l'ajustement de la force de Gogny 300 keV au dessus de l'oscillation pair-impair des masses expérimentales [105].

A la vue de la présente discussion, des calculs explicites de mélange de configurations au-delà du champ moyen dans l'espace des états à 0, 2 et 4 qps sont nécessaires pour évaluer quantitativement l'effet de ces couplages dans les systèmes pairs et impairs.

⁸Il s'agit des états bleus de plus basse énergie sur la Fig. 4.2.

⁹Les états que nous avons définis par l'intermédiaire de l'Eq. 4.58 comme des états à 4 qps (dont $\tilde{\eta}_n^\dagger$) sur le fondamental impair sont les états définis dans les Ref. [104] comme les états à trois qps sur le vide de nombre parité pair ne contenant pas la qp η_n^\dagger .

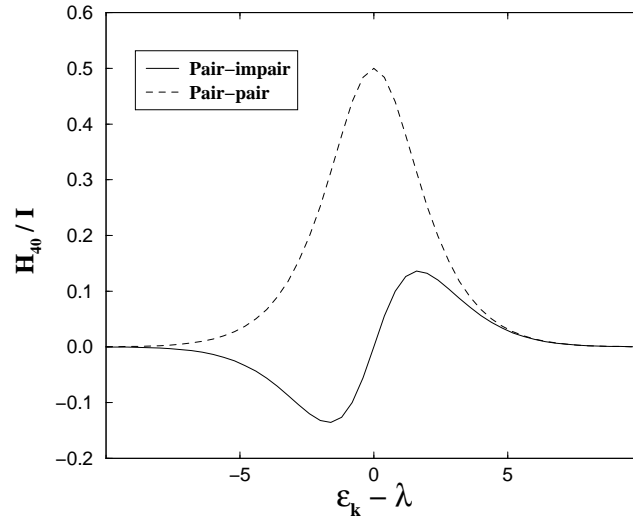


FIG. 4.3 – Éléments de matrice de couplage entre l'état fondamental HFB et les états à quatre qps de plus basse énergie calculés en perturbation et tracés en fonction de l'énergie individuelle associée aux qps créés (voir texte). La figure compare les éléments de matrice caractérisés par les mêmes nombres quantiques, dans le cas d'un noyau pair-pair d'une part et d'un noyau pair-impair d'autre part.

4.2.7 HFB dans l'espace réel.

Nous avons dérivé les méthodes HF et HFB sous forme matricielle, de telle sorte que toutes les quantités d'intérêt ont été écrites en termes de leurs éléments de matrice dans une base à un corps donnée. Cette base à un corps doit faire l'objet d'un choix pour résoudre explicitement le problème. Jusqu'ici, les états de cette base ont été implicitement indicés par des nombres quantiques discrets. Cela sous entend qu'ils sont les états propres d'un opérateur à un corps dont les fonctions associées sont toutes localisées dans l'espace.

D'un autre côté, le potentiel nucléaire s'annule à une distance de l'ordre de la portée de la force nucléon-nucléon. Le spectre individuel associé à ce potentiel présente nécessairement une partie discrète pour les énergies négatives et une partie continue pour les énergies positives; un nucléon n'étant localisé dans l'espace que s'il occupe un état d'énergie négative. L'utilisation d'une base purement discrète dans la résolution du problème engendre des difficultés quant à la reproduction de certaines propriétés nucléaires liées au continuum d'états à un corps. En effet, le nombre nécessairement fini des états de base considérés dans un calcul explicite ne permettra pas une reproduction fidèle des propriétés asymptotiques des états du continuum. Tandis que cela influe peu sur les propriétés des noyaux proches de la stabilité, cela devient problématique pour les systèmes peu liés dans lesquels les nucléons occupent, pour le moins virtuellement, ces états du continuum.

Afin de contourner ce problème, il est possible de formuler la théorie HFB dans la base propre continue de l'opérateur position \vec{r} [102, 106]. Suivant les définitions de l'annexe E.1, nous pouvons écrire la matrice densité à un corps et le tenseur d'appariement sous la forme :

$$\rho(\vec{r} s_z t, \vec{r}' s'_z t') = \frac{\langle \Phi | c^\dagger(\vec{r}' s'_z t') c(\vec{r} s_z t) | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \quad (4.63)$$

$$= \sum_{IJ\zeta'_z\zeta_z} \varphi_I^*(\vec{r}', \zeta'_z, s'_z, t') \varphi_J(\vec{r}, \zeta_z, s_z, t) \rho_{ji}$$

$$= \oint V^{\mu*}(\vec{r}', s'_z, t') V^\mu(\vec{r}, s_z, t)$$

$$\kappa(\vec{r} s_z t, \vec{r}' s'_z t') = \frac{\langle \Phi | c(\vec{r}' s'_z t') c(\vec{r} s_z t) | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \quad (4.64)$$

$$= \sum_{IJ\zeta'_z\zeta_z} \varphi_I(\vec{r}', \zeta'_z, s'_z, t') \varphi_J(\vec{r}, \zeta_z, s_z, t) \kappa_{ji}$$

$$= \oint V^{\mu*}(\vec{r}', s'_z, t') U^\mu(\vec{r}, s_z, t)$$

où les fonctions de qp $[U^\mu(\vec{r}, s_z, t), V^\mu(\vec{r}, s_z, t)]$ sont solutions du problème aux valeurs propres 4.31 réécrit dans la base à un corps E.2 et prennent la forme :

$$\begin{bmatrix} U^\mu(\vec{r}, s_z, t) \\ V^\mu(\vec{r}, s_z, t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{I\zeta_z} U_{i\mu} \varphi_I(\vec{r}, \zeta_z, s_z, t) \\ \sum_{I\zeta_z} V_{i\mu} \varphi_I(\vec{r}, \zeta_z, s_z, t) \end{bmatrix}, \quad (4.65)$$

tandis que le domaine d'intégration dans les Eq. 4.63 et 4.64 tient compte du fait qu'une partie du spectre de qps est continu :

$$\oint \dots = \sum_{0 < E_\mu < -\lambda} \dots + \int_{-\lambda}^{\infty} \dots \quad (4.66)$$

On peut montrer que les densités $\rho(\vec{r} s_z t, \vec{r}' s'_z t')$ et $\kappa(\vec{r} s_z t, \vec{r}' s'_z t')$ sont localisées dans l'espace si $\lambda < 0$ [102, 106], c'est à dire qu'elles s'annulent pour \vec{r} et/ou $\vec{r}' \rightarrow \infty$. Ce résultat essentiel montre que malgré la diffusion de paires virtuelles dans les états du continuum HF, la diagonalisation HFB est telle que la densité d'un système lié reste localisée.

En plus de révéler les caractéristiques asymptotiques des solutions, l'écriture du problème HFB dans l'espace réel permet de maîtriser explicitement les propriétés des fonctions du continuum HF ou HFB en choisissant les conditions aux limites lors de la diagonalisation du hamiltonien HF ou de la matrice HFB. Cela autorise notamment une prise en compte correcte des résonances à un corps. Celles-ci jouent un rôle essentiel dans la reproduction des comportements exotiques dans les noyaux faiblement liés tels que les peaux de neutrons ou les halos. Le choix standard consiste à résoudre ces équations dans une

boite de dimension typique R et d'imposer aux solutions de s'annuler sur la frontière du domaine [9, 107]. Afin que cette condition non-physique ne perturbent pas les résultats, la taille de la boite doit être suffisamment grande. Cette condition peut dans certains cas nécessiter une taille tellement importante qu'il devient intéressant de développer d'autres méthodes. Il a par exemple été proposé récemment de résoudre les équations HFB dans une boite avec des conditions aux limites d'états de diffusion [10]. La discrétisation ultime du continuum, obligatoire dans toute résolution numérique, permet alors de sélectionner un plus grand nombre d'états au voisinage d'une résonance et donc de prendre en compte sa largeur de manière plus précise. Notons que les résultats présentés dans ce mémoire sont tous issus de calculs sur réseau utilisant les conditions de nullité des fonctions aux frontières de la boite.

4.2.8 Prescription de Lipkin-Nogami.

Nous anticipons ici les restaurations de symétrie en introduisant une méthode de restauration approchée du bon nombre de nucléons dans la fonction d'onde HFB. Cela est fait ici puisque tous les calculs rapportés présenteront au minimum cette projection approchée. En ce sens, aucun calcul de pur champ moyen ne sera discuté.

La prescription de Lipkin-Nogami (LN) [108, 109, 110] simule la méthode de variation après projection (VAP). Elle est particulièrement importante dans les situations de faible appariement où les méthodes de champ moyen HF+BCS ou HFB échouent dans la détermination d'une solution non-triviale de l'équation du gap. Ces situations sont celles d'une faible brisure de symétrie où la théorie du champ moyen fournit une mauvaise approximation de la fonction d'onde comme de l'énergie. Tel est le cas des noyaux de transition ou des noyaux en rotation rapide [111, 23].

La prescription en question consiste à modifier l'énergie minimisée. Tandis que l'énergie HFB l'était sous la contrainte d'avoir le bon nombre de nucléons en moyenne, l'énergie HFBLN sera donnée par $\mathcal{E}^{HFBLN}[\rho]' = \mathcal{E}^{HFB}[\rho]' - \lambda_2 \langle \Delta N^2 \rangle$, où :

$$\langle \Delta N^2 \rangle = \frac{\langle \Phi | N^2 | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} - \left(\frac{\langle \Phi | N | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \right)^2, \quad (4.67)$$

et :

$$\lambda_2 = \frac{\langle H(\Delta N^2 - \langle \Delta N^2 \rangle) \rangle - \langle H \Delta N \rangle \langle \Delta N^3 \rangle / \langle \Delta N^2 \rangle}{\langle \Delta N^4 \rangle - \langle \Delta N^2 \rangle^2 - \langle \Delta N^3 \rangle^2 / \langle \Delta N^2 \rangle}. \quad (4.68)$$

Les équations HFBLN sont obtenues par une minimisation de $\mathcal{E}^{HFBLN}[\rho]'$ où λ_2 n'est pas varié mais calculé de manière auto-cohérente à chaque itération selon la formule 4.68. On obtient un problème similaire au problème HFB où l'expression et la valeur des observables sont modifiées. D'ailleurs, il est important de noter que la valeur moyenne associée à tout opérateur doit être calculée en accord avec la projection approchée de la fonction d'onde. Nous ne rentrons pas dans plus de détails et renvoyons le lecteur aux Ref. [112, 113, 111, 25, 26].

4.3 Forces effectives.

Nous avons déjà explicité selon quelle perspective nous inscrivons la notion d'interaction effective dans le canal p-t. Il s'agit d'un vertex à quatre pattes externes associé à une resommation de diagrammes dans un développement perturbatif de l'énergie vraie écrit en termes de l'interaction nucléon-nucléon libre. Le cadre dans lequel nous nous sommes placés est celui de la théorie de perturbation de Goldstone-Brueckner. Trois précisions peuvent être apportées :

- Le vertex à quatre pattes est généralement considéré comme un opérateur à deux corps même s'il ne peut, en toute rigueur, être défini indépendamment du diagramme dans lequel il est inséré. D'ailleurs, bien qu'il soit possible d'identifier ce vertex effectif, l'énergie approchée de l'état fondamental à un ordre donné de la théorie de perturbation ne peut s'écrire comme sa valeur moyenne dans un état approché bien défini. Tel est le cas par exemple pour l'énergie de champ moyen définie par l'Eq. 3.22. Nous reviendrons ultérieurement sur ce point.

- Les forces effectives que nous utiliserons dans le canal p-t sont donc comprises comme des approximations de la matrice G de Brueckner [66, 67, 68]. Leur caractère phénoménologique provient du fait que le lien avec cette matrice G , et donc avec la force nue, n'est considéré qu'implicitement comme une façon de caractériser leurs propriétés, tandis qu'elles sont ajustées sur les données expérimentales. La raison en est que les tentatives de dérivation explicite depuis la force nue, bien que satisfaisantes du point de vue qualitatif, se sont révélées impuissantes jusqu'à ce jour à reproduire quantitativement les propriétés de la matière nucléaire ou des noyaux finis [65].

D'après la section 3.2.5, la matrice G dépend explicitement du diagramme dans lequel elle est insérée. Par conséquent, les approximations qui mènent aux forces effectives phénoménologiques dépendent de l'ordre considéré dans le développement [67]. Cela rappelle que l'emploi d'une force effective définie au niveau du champ moyen à un ordre supérieur est en toute rigueur un abus vis à vis de ses prérogatives. Qui veut en faire une utilisation rigoureuse au-delà du champ moyen doit en principe revenir à la resommation diagrammatique correspondante et redévelopper le schéma d'approximations depuis ce nouvel ordre des perturbations.

- De la même façon qu'il a été possible d'immerger l'approximation de champ moyen HF dans la théorie de perturbation de Goldstone-Brueckner pour en tirer des informations sur la force effective dans ce canal, il est possible d'immerger l'approximation de champ moyen HFB dans une théorie de perturbation généralisée. Celle-ci s'écrit en termes des propagateurs normaux R et anormaux K^\dagger et permet d'extraire des propriétés générales de la force effective dans le canal p-p. Le formalisme utilisé est celui des fonctions de Green [114, 115]. Les équations régissant le système superfluide sont les équations de Gorkov [116] définissant les propagateurs en termes de la self-énergie S et de la fonction de gap D . Un système auto-cohérent est obtenu à travers l'équation liant S à R par l'intermédiaire de la matrice de diffusion T et l'équation généralisée du gap liant D à K par l'intermédiaire du noyau d'interaction

irréductible F . Cette méthode permet une renormalisation cohérente des vertex et des propagateurs, qu'ils soient normaux (canal p-t) ou anormaux (canal p-p). On montre que, si en raison du cœur dur de l'interaction la matrice de diffusion T à l'ordre le plus bas des perturbations est bien la matrice G de Brueckner, le vertex irréductible F à utiliser dans l'équation du gap se réduit à cet ordre à la force nue [117]. Les propagateurs normaux et anormaux sont à ce niveau d'approximation la matrice densité ρ et le tenseur d'appariement κ de champ moyen définis par les Eq. 4.29. Le fait que le vertex d'interaction à utiliser dans le canal d'appariement soit irréductible (au sens défini dans la section 3.2.5) est dû au fait que l'équation du gap somme explicitement des échelles p-p de type Brueckner [118], de telle sorte que l'utilisation d'une matrice G dans le canal p-p est à proscrire sous peine de double comptage.

La théorie de perturbation permet d'aller au-delà de l'approximation de champ moyen. Cela induit une renormalisation des propagateurs produisant une forme généralisée de l'équation du gap et de la self-énergie (qui dépendent alors de l'énergie) dans un processus auto-cohérent. Cela s'accompagne également d'une renormalisation des vertex à utiliser dans ces équations. En ce qui concerne la force d'appariement, les termes suivant la force nue dans le développement prennent en compte les effets de polarisation du milieu caractérisés par l'excitation à tous les ordres d'une paire p-t comme état intermédiaire dans le vertex ("ring series"). Il faut dans le même temps renormaliser la matrice G dans le canal p-t par les mêmes diagrammes. Un traitement complet de ces effets est hors d'atteinte à l'heure actuelle dans la matière nucléaire infinie (et donc dans les noyaux finis!), notamment en raison de la dépendance en énergie acquise par toutes ces quantités lors de la renormalisation. Des traitements approchés montrent cependant que la prise en compte des effets de polarisation du milieu dans la matière nucléaire sur la seule force d'appariement a pour effet net une diminution du gap en raison de la prédominance des effets de fluctuation de densité de spin (répulsif) sur les effets de fluctuation de densité (attractif) associés à cette polarisation [119]. En revanche, prenant en compte l'effet de ces corrélations sur la self-énergie dont on sait qu'elles augmentent la masse effective et donc la densité de niveaux à l'énergie de Fermi, l'effet opposé se produit sur l'appariement [119]. Le résultat net est aujourd'hui soumis à trop d'approximations pour permettre une conclusion définitive. Cependant, ce processus d'annulation de l'effet de la polarisation fournit une explication possible de la bonne reproduction des données expérimentales liées à l'appariement dans le canal $T = 1$ par les forces nues [120]. Cette conclusion est malgré tout remise en cause par des calculs tentant d'inclure ces effets de manière (auto)-cohérente dans les noyaux finis [121]. Ces calculs traduisent l'effet de la polarisation du milieu à tous les ordres par l'échange de vibrations entre nucléons dans les états renversés du temps. Cet effet est pris en compte de manière itérative, à la fois sur la self-énergie et sur l'appariement des nucléons. La conclusion met en relief l'importance du couplage aux vibrations de surface de basse énergie qui semble induire un fort appariement impossible à déceler bien évidemment dans les calculs de matière nucléaire infinie. Le gap généré dans le ^{120}Sn par cette interaction indirecte serait responsable de 40 % de la différence de masse pair-impair observée expérimentalement. Malgré tout, ces conclusions sont

sujettes à caution en raison de la nécessité d'introduire la force nue de manière cohérente dans ces calculs.

Nous allons essentiellement nous concentrer dans la suite sur la force de Skyrme [122], que nous comparerons à l'occasion à la force de Gogny [105, 123]. La principale différence entre les deux concerne la portée finie de la force de Gogny lui permettant notamment d'être utilisée dans le canal d'appariement sans problème de divergence¹⁰.

En principe, une force effective devrait être utilisée dans les deux canaux de la force comme c'est le cas de la force de Gogny ou de la force de Skyrme SkP [102]. Cependant, le fait que les deux canaux soient clairement différenciés dans la méthode HFB permet d'y modéliser la force de manière différente. Cela se justifie en premier lieu par la nature différente du caractère effectif de la force dans les deux canaux, mais aussi d'un point de vue plus opérationnel par notre méconnaissance des propriétés de la force dans le canal d'appariement au regard de celles de la force dans le canal p-t.

Enfin, la force de Coulomb entre protons est bien évidemment incluse dans les calculs microscopiques. À l'approximation du champ moyen, le terme direct de la force de Coulomb est traité exactement tandis que le terme d'échange, plus lourd numériquement, est généralement traité à l'approximation de Slater. Nous renvoyons à la Ref. [37], ainsi qu'à celles y étant incluses, pour une discussion sur la validité de cette approximation et sur les corrélations engendrées par la force de Coulomb au-delà du champ moyen.

4.3.1 Canal particule-trou.

La force de Skyrme est une force de portée nulle, dépendant des vitesses et de la densité. Dans sa version moderne, elle prend le plus souvent la forme [125] :

$$\begin{aligned}
 v_{Skyrme}(\vec{R}, \vec{r}, \vec{k}, \overleftarrow{k'}) &= t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}) \\
 &+ \frac{1}{2} t_1 (1 + x_1 P_\sigma) (\delta(\vec{r}) \vec{k}^2 + \overleftarrow{k'}^2 \delta(\vec{r})) \\
 &+ t_2 (1 + x_2 P_\sigma) \overleftarrow{k'} \cdot \delta(\vec{r}) \vec{k} \\
 &+ \frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 P_\sigma) \left[\rho_0(\vec{R}) \right]^\sigma \delta(\vec{r}) \\
 &+ iW_0 (\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2) \overleftarrow{k'} \wedge \delta(\vec{r}) \vec{k} ,
 \end{aligned} \tag{4.69}$$

où $\vec{k} = (\nabla_1 - \nabla_2)/2i$ est l'opérateur impulsion relative agissant sur \vec{r} vers la droite, tandis que $\overleftarrow{k'}$ représente le même opérateur au signe près agissant vers la gauche. $P_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2)$ est l'opérateur d'échange de spin ; t_i, x_i, W_0, σ désignent les paramètres ajustables. Utilisant cette force effective, l'énergie de champ moyen HF définie par les Eq. 3.22/4.6 se réécrit comme l'intégrale simple sur \vec{R} d'une densité d'énergie. Cette densité d'énergie est une forme bilinéaire des densités et courants locaux définis à partir de la matrice

¹⁰Notons que ces portées rendent difficiles, mais pas impossible, la résolution du problème HFB dans l'espace des coordonnées. Récemment, une amélioration du traitement du continuum pour la force de Gogny a été proposé à travers l'utilisation d'une base permettant un calcul simple de ses éléments de matrice tout en présentant un spectre en énergie pour partie continu [124].

densité $\rho(\vec{r} s_z t, \vec{r}' s'_z t')$, jusqu'à l'ordre deux dans les dérivées par rapport à \vec{r} et \vec{r}' . Celle-ci comprend exclusivement des termes invariants par réflexion, renversement du temps, rotation, translation et rotation dans l'espace d'isospin [126]. Cela autorise le produit de deux densités et/ou courants impairs par renversement du temps. Les définitions des densités et courants locaux ainsi que l'expression de la fonctionnelle sont données dans l'annexe E.

Propriétés remarquables : Précisons quelques caractéristiques de la force de Skyrme qui feront l'objet de discussions ou d'études spécifiques dans ce travail. Pour une analyse récente et exhaustive des propriétés des forces de Skyrme, le lecteur est invité à se reporter à la Ref. [37].

- La force de Skyrme présente une dépendance dans la densité locale scalaire-isoscalaire de champ moyen sous la forme d'une fonction puissance $[\rho_0(\vec{R})]^\sigma$. Cette dépendance peut-être reliée aux effets de milieu associés à la resommation de Brueckner, discutée dans la section 3.2, à travers une approximation de densité locale. Une autre interprétation possible repose sur la renormalisation d'une force à trois corps de portée nulle, à condition que $\sigma = 1$. Cette seconde interprétation n'est valable en toute rigueur que pour les systèmes invariants par renversement du temps. Autrement dit, une force à trois corps de portée nulle ne produit pas une dépendance linéaire des coefficients C_T^s des termes impairs sous renversement du temps (voir annexe E) dans la densité scalaire-isoscalaire telle qu'elle est obtenue avec la force à deux corps pour $\sigma = 1$. En fait, une force à trois corps de portée nulle est à éviter puisqu'elle engendre une instabilité de spin [127, 128] gênante pour la description des états d'excitations et des fondamentaux impairs. Notons pour finir que, dans la présente version de la force, une valeur réaliste de l'incompressibilité dans la matière nucléaire K_∞ [129] requiert une valeur de σ entre 1/6 et 1/3 [125].
- Le fait que cette dépendance dans le milieu se traduise par une simple dépendance dans la densité *locale*, qui plus est *scalaire-isoscalaire*, est évidemment une simplification. Son caractère local est à relier au développement de la matrice densité (DME) tel qu'il a été défini par Negele et Vautherin [66, 67, 68], et qui montre la validité croissante d'une approximation purement locale à mesure que l'on s'intéresse à des noyaux plus lourds. Le caractère scalaire est lié au fait que cette approximation a été dérivée explicitement pour l'état fondamental d'un noyau pair-pair. La nécessité d'une dépendance dans les densités de spin pour décrire certaines propriétés exotiques n'est pas à exclure bien que rien ne puisse être dit sur ce point aujourd'hui. Enfin, le caractère isovectoriel constitue une approximation relativement bien justifiée pour les noyaux proches de la stabilité. Allant vers la drip-line, cette simple dépendance pourrait se révéler insuffisante. Une meilleure connaissance des propriétés isovectorielles de la force effective constitue un objectif de tout premier ordre dans l'étude des noyaux riches en neutrons [6, 41].

- Les termes pairs sous renversement du temps dans la fonctionnelle de Skyrme sont ajustés sur quelques propriétés de la matière nucléaire telles que l'énergie par particule, la densité de saturation, l'incompressibilité, l'énergie de symétrie et de surface, mais aussi sur des propriétés des états fondamentaux de noyaux pair-pair doublement magiques telles que des énergies de liaison, des rayons de charge et un écart entre partenaires spin-orbit [37]. Utilisant cette stratégie, tous les paramètres de la force de Skyrme sont ajustés, de telle sorte que les termes impairs non fixés a priori par l'invariance de jauge (voir Annexe E), le sont sans qu'aucune propriété qui leur soit spécifique n'ait été prise en compte. La justification de cette stratégie repose à la fois sur la lourdeur des calculs numériques lorsque la brisure de l'invariance par renversement du temps est prise en compte, mais aussi sur la difficulté d'isoler des observables et donc des données expérimentales très directement liées à ces termes. Ces deux raisons ont interdit jusqu'ici la possibilité d'inclure des contraintes explicites sur les termes impairs de la fonctionnelle de Skyrme dans les procédures d'ajustement des forces. Une telle situation peut être préjudiciable quant à la reproduction et à la prédiction des observables mettant en jeu une brisure de l'invariance par renversement du temps. Tel est le cas des noyaux en rotation où la densité de courant et les canaux impairs liés au couplage spin-orbit par l'intermédiaire de l'invariance de jauge jouent un rôle important. Les termes impairs influent également sur les masses et les énergies de particules indépendantes des noyaux pair-impair et impair-impair.

Si de telles contraintes sont incluses, l'ajustement des observables liées aux termes pairs devra être reconsidéré. Un moyen d'éviter ce problème est de prendre la fonctionnelle de la densité comme ingrédient de base, ce qui élimine les corrélations entre les différents coefficients puisque la fonctionnelle E.11 n'est plus reliée à une force à deux corps sous-jacente [32, 37].

- La force dont sont issus les résultats présentés dans ce mémoire est la force Sly4 ajustée notamment pour reproduire une équation d'état réaliste pour la matière de neutrons [125].

4.3.2 Canal particule-particule.

Nous avons jusqu'ici détaillé les propriétés de la force dans le canal p-t. La densité d'énergie caractérisée par l'Eq. E.11 dans la théorie HF peut être étendue à la théorie de champ moyen HFB à condition de la généraliser à une fonctionnelle des densités anormales locales et de leurs dérivées. Cela requiert également une force effective de portée nulle dans le canal p-p. Notons dès à présent que seules des fonctionnelles bilinéaires en les densités locales anormales :

$$\kappa_0(\vec{r}) \equiv \kappa_{1/2}(\vec{r}) + \kappa_{-1/2}(\vec{r}) = \sum_{s_z t} \kappa(\vec{r} s_z t, \vec{r} s_z t) \quad (4.70)$$

$$\kappa_1(\vec{r}) \equiv \kappa_{1/2}(\vec{r}) - \kappa_{-1/2}(\vec{r}) = \sum_{s_z t} \kappa(\vec{r} s_z t, \vec{r} s_z t) 2t \quad (4.71)$$

associées à une force d'appariement de la forme :

$$v_{T_z}^{p-p}(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{V_{0,T_z}}{2} (1 - P_\sigma) \left[1 - \left(\frac{\rho_0(\vec{R})}{\rho_c} \right)^\alpha \right] \delta(\vec{r}) , \quad (4.72)$$

seront considérées ici. Quelques calculs ont été réalisés par le passé au moyen d'une force de Skyrme dans le canal p-p (force SkP [102]) induisant également une dépendance de la fonctionnelle en la densité d'énergie cinétique de paires. La force 4.72 fournit une densité d'énergie d'appariement de champ moyen de la forme :

$$\mathcal{E}^{p-p}(\vec{r}) = \sum_{t=\pm 1/2} \frac{V_{0,2t}}{4} \left[1 - \left(\frac{\rho_0(\vec{r})}{\rho_c} \right)^\alpha \right] \kappa_t^2(\vec{r}) . \quad (4.73)$$

Propriétés remarquables :

- $v_{T_z}^{p-p}$ n'agit que dans le canal ($T = 1, T_z = \pm 1, S = 0, L = 0$), c'est à dire que nous excluons l'appariement proton-neutron de la description et que nous ne considérons que des paires de moment orbital nul. L'appariement neutron-proton n'est pas considéré. Il est à noter que l'énergie de Wigner n'est pas reproduite dans une telle version des calculs de champ moyen. La force est de portée nulle tandis que sa dépendance dans la densité scalaire-isoscalaire se traduit selon la valeur des paramètres ρ_c et α par un caractère de surface plus ou moins marqué.
- De nombreuses études portant sur des bandes rotationnelles superdéformées [23, 29], sur les propriétés rotationnelles des actinides [30], sur les noyaux à halos [130] ou sur l'évolution des rayons de charge au passage des nombres magiques [131, 100] ont contribué à asseoir le pouvoir reproductif et prédictif de cette force d'appariement. Ces études ont notamment confirmé du point de vue phénoménologique la prédominance de la force à la surface du noyau. Récemment, des études plus systématiques portant sur les propriétés asymptotiques des densités locales de matière et de paires dans les noyaux exotiques [132], sur l'évolution des gap d'appariement vers la drip-line [133] ou encore sur l'évolution moyenne des différences de masses pair-impair avec le nombre de masse [134] ont permis d'en préciser les caractéristiques. Ainsi, une compatibilité optimale avec les données expérimentales a

été trouvée pour une force entre volume et surface [30, 134] avec $\rho_c = 2\rho_{sat}$, où $\rho_{sat} = 0.16 \text{ fm}^{-3}$ est la densité de saturation. La grande sensibilité des densités dans la limite $\rho \rightarrow 0$ a permis de contraindre a priori la valeur de l'exposant α à l'intervalle $[1/2, 1]$. Ces résultats ne sont pas complètement validés à l'heure actuelle, mais un nombre assez limité de masses le long de quelques lignes isotopiques pourrait permettre de discriminer les différents régimes possibles de la force définie par l'Eq. 4.72. Il faut également indiquer que la dépendance de la force dans la densité isovectorielle est inconnue aujourd'hui mais devrait pouvoir être sondée dans les noyaux riches en neutrons.

- La portée nulle de la force d'appariement engendre un problème quant à la convergence naturelle de l'équation du gap en fonction de l'énergie des paires impliquée dans le processus [106]. Une telle force n'a de sens que si elle est accompagnée d'une coupure en énergie. Cette coupure peut être définie par rapport au spectre de particules indépendantes HF à l'aide d'une distribution de Fermi sélectionnant les états jusqu'à une certaine énergie au dessus du niveau de Fermi [107, 135] (ajustée dynamiquement [113] ou non en fonction de la masse). Elle peut également être définie par rapport au spectre de quasi-particules [102], ce qui requiert d'aller jusqu'à des énergies de l'ordre de 50 MeV pour prendre en compte les qps associées aux états individuels du fond du puit nucléaire. Cette coupure gouvernant le nombre d'états impliqués dans la diffusion de paires est nécessairement corrélée à l'intensité V_{0,T_z} de la force ainsi qu'à la masse effective de la force dans le canal p-t. Ce lien peut être implicite lors de l'ajustement de la force [135, 29] ou explicite selon une prescription permettant de reproduire la longueur de diffusion neutron-neutron (18.5 fm) dans la limite de densité nulle [130, 136, 120].
- La force d'appariement dont sont issus les résultats présentés dans ce mémoire est définie par l'Eq. 4.72 avec les paramètres $V_{0,\pm 1} = -1250 \text{ MeV}\cdot\text{fm}^3$, $\rho_c = \rho_{sat}$, $\alpha = 1$ et un cut-off défini par rapport au spectre HF incluant les états situés dans une bande de $\pm 5 \text{ MeV}$ autour du niveau de Fermi. Cette force ne dépend pas de la région de la table de masse dans laquelle elle est utilisée.

Origine de la dépendance en densité : Étant donnés ses fondements perturbatifs, la force effective d'appariement doit s'apparenter à la force nue au niveau d'approximation qui nous intéresse. Ainsi, la dépendance en densité apparaissant dans l'Eq. 4.72 ne peut être associée à des resommations du problème à N corps. Bien qu'aucune analyse théorique ne soit en mesure aujourd'hui de justifier précisément la dépendance utilisée, il est intéressant d'essayer d'en spécifier les origines possibles.

- Intéressons-nous tout d'abord au cas de la force de Gogny. Celle-ci, bien que s'apparentant à une matrice G dans le canal p-t, se comporte effectivement comme une force nue dans le canal d'appariement 1S_0 [130, 120]. Cela est lié à la fois à la non contribution de la dépendance en densité dans ce canal pour les ajus-

tements existants [105, 137] et à sa grande longueur de diffusion (12.16 fm pour la paramétrisation D1S [137]). Ce résultat doit cependant être entendu dans son véritable sens : tandis que la force de Gogny prédit le même comportement du gap d'appariement 1S_0 dans la matière nucléaire que ne le fait une force nue raisonnable [120], elle est très différente d'une telle interaction nucléon-nucléon libre. Notamment, l'absence d'un cœur répulsif dans la force de Gogny fait converger l'équation du gap pour une énergie de qp de l'ordre de 100 MeV [124] tandis que pour une interaction nue, les états du continuum contribuent de manière significative au gap au niveau de Fermi jusqu'à des excitations de l'ordre du GeV [138, 139, 140]. Finalement, la force de Gogny peut être vue comme une force effective dans laquelle la contribution des états de haute énergie à l'équation du gap générée par le cœur dur a été préalablement resommée [138, 139]. Cela s'apparente à une sommation préalable et partielle (au-delà d'une certaine énergie) de diagrammes à deux corps en échelles. Les détails de cette correspondance formelle - la force de Gogny n'ayant pas été dérivée ainsi - ne semblent pas être essentiels à partir du moment où la force effective résultante utilisée dans l'équation du gap tronquée possède une longueur de diffusion réaliste dans le canal 1S_0 .

- Étant donnée cette équivalence asseyant la force de portée finie de Gogny comme une référence dans le canal p-p, il devient possible de mieux comprendre comment la dépendance en densité couplée à l'utilisation d'une coupure en énergie pour la force de portée nulle n'est pas orthogonale aux arguments requérant une force nue dans ce canal.

Il est avant tout nécessaire de comprendre que la véritable pathologie d'une force de portée nulle est de produire une portée infinie dans l'espace des impulsions (énergies). Afin de simuler une portée finie dans cet espace, il semble naturel d'accompagner la coupure en énergie définie plus haut par un facteur de décroissance en fonction de l'impulsion des nucléons en interaction [120]. Traduit dans le langage de l'approximation de densité locale, ce facteur de décroissance suggère un profil de la force dans l'espace tel qu'il est donné par l'Eq. 4.72. Cette interprétation est corroborée par un traitement plus global et fondamental des divergences liées à la portée nulle. En effet, la régularisation de la divergence de la densité anormale locale dans un système fini se traduit, au premier ordre dans la portée, par une renormalisation de la constante de couplage de la force en fonction de la densité locale, prenant qualitativement la forme définie par l'Eq. 4.72 [141].

Le succès et la justification théorique de la dépendance en densité peut donc se comprendre comme une renormalisation de la portée de la force sans qu'il soit nécessaire d'invoquer une quelconque resommation d'effets de milieu. Cette interprétation est validée par la capacité d'une telle force à reproduire le gap donné par la force de Gogny ou une force nue dans la matière nucléaire [120, 100]. A l'inverse, une force de portée nulle sans renormalisation de l'intensité dans l'espace ne permet pas de le faire [100]. Malgré la difficulté de déterminer la valeur optimale de l'exposant α (et du cut-off global) par la reproduction de ce gap dans la matière nucléaire, les valeurs trouvées sont compatibles avec l'intervalle $1/2 < \alpha < 1$ proposé récemment dans une étude portant sur les noyaux finis [132].

- Notons pour finir que la renormalisation de forces à plus de deux corps peut engendrer une “véritable” dépendance en densité [100] de la force d’appariement au niveau du champ moyen. Les deux origines possibles de cette dépendance en densité sont renormalisées simultanément à travers l’ajustement phénoménologique de la force 4.72.

Volume versus surface : Penchons-nous à présent sur le caractère de volume ou de surface du processus d’appariement des nucléons dans le noyau. Il faut pour cela séparer trois aspects.

- Tout d’abord, il existe l’aspect lié à la densité. Celle-ci, plus faible à la surface que dans le volume, favorise l’appariement des nucléons à la surface en vertu des calculs du gap dans la matière nucléaire. En effet, le maximum du gap au niveau de Fermi est systématiquement trouvé pour une densité de l’ordre de $\rho_0/5$. L’apparition correcte de cet effet est directement lié au traitement de la portée de la force puisque la reproduction des gaps fournis par une force nue ou par la force de Gogny [120] est impossible pour une force de portée nulle sans renormalisation de la constante de couplage dans l’espace [142, 100]. Ce premier effet n’est donc pas à proprement parlé un effet de surface mais plutôt de densité.
- Le second aspect, lui, est directement lié à l’existence d’une surface dans le noyau. Il concerne la cohérence spatiale des fonctions d’ondes actives dans le processus d’appariement. En effet, en tant qu’interaction résiduelle, l’appariement concerne essentiellement les états à la surface de Fermi ¹¹ qui sont plutôt localisés à la surface du noyau¹², et cela de manière cohérente en raison de la surface du potentiel.

Tels qu’ils sont définis, ces deux processus concernent l’appariement statique. Le second n’implique aucune définition particulière de la force puisqu’il est simplement lié à la structure de l’équation du gap et des fonctions d’onde individuelles dans le noyau.

Les calculs HFB dans les noyaux finis, qu’ils soient réalisés avec la force nue [139], la force de Gogny ou la force de portée nulle dépendant de la densité, fournissent des gaps et des densités de paires fortement piqués à la surface. Le comportement de la densité de matière à la surface et au delà est également influencé par cet aspect de l’appariement du fait de l’auto-cohérence entre le canal p-t et le canal p-p. Faisant le lien avec la discussion sur la dépendance en densité de la force, il est à noter qu’une paramétrisation plus élaborée de la force d’appariement de portée nulle introduisant par exemple des gradients de densités ne peut être liée au niveau du champ moyen qu’à un raffinement du traitement de la portée de la force [141].

- Le dernier aspect est lié aux effets au-delà du champ moyen issus par exemple de

¹¹Même si la non-linéarité de l’équation du gap couplée au cœur dur de l’interaction nue nécessite la prise en compte d’états loin de la surface de Fermi.

¹²Cela n’est pas valable pour un état s .

l'échange de vibrations de surface. D'après les calculs déjà mentionnés [121], ce processus semble induire un appariement dynamique relativement fort et très localisé à la surface du noyau. Ces résultats signifient que les calculs de pur champ moyen ne devraient pas être ajustés sur l'expérience dans la perspective de prendre explicitement en compte ces effets en allant au-delà du champ moyen. Selon une stratégie plus proche de la fonctionnelle de l'énergie, ces effets peuvent être renormalisés en incluant des termes magnifiant l'appariement à la surface dans la fonctionnelle 4.73. Ceux-ci devant être absents dans la matière nucléaire infinie, des termes en gradients de densités (normale ou anormale) semblent les plus appropriés pour renormaliser de tels processus [100]. Cela nécessiterait un réajustement du facteur dépendant de la densité dans l'expression de la force 4.72.

Pour finir, considérons le terme $\Gamma^{p-p, [\rho]}$ produit dans le champ moyen HF par la dépendance en densité de la force d'appariement (voir section 4.2). Il est important de préciser que ce terme ne doit apparaître que si la dépendance en densité simule un effet de milieu modifiant l'interaction à deux corps lors de l'ajout ou du retrait d'un nucléon. Tandis que la renormalisation d'une force à trois corps ou le couplage aux vibrations de surface rentre dans ce cadre, la simulation de la portée de la force à deux corps par un facteur dépendant de $\rho_0(\vec{R})$ dans l'Eq. 4.72 n'y rentre pas. Ainsi, la pertinence de ce terme est soumise à l'interprétation faite de la dépendance en densité dans le canal p-p.

Deuxième partie

Lien entre noyaux pair-pair et
pair-impair [39, 143].

Nous avons explicité dans les sections 4.1 et 4.2 la façon de comprendre et de décrire les noyaux pair-pair et les noyaux pair-impair au niveau du champ moyen. Leur traitement respectif, en présence (théorie HFB) ou en l'absence d'appariement (théorie HF), est tout à fait satisfaisant. En revanche, le traitement et la compréhension du lien qui les unie ne l'est pas nécessairement. Nous nous proposons donc d'étudier la cohérence globale du schéma théorique de champ moyen, et cela quelque soit l'intensité de l'appariement dans le système.

Dans cette perspective, il est nécessaire de se pencher sur la formalisation du lien entre la fonction d'onde d'un noyau et celle du noyau voisin dans le traitement avec et sans appariement. Nous commencerons par rappeler la façon usuelle de comprendre cette formalisation afin d'en relever certaines limites. Nous proposerons alors des modifications simples permettant de donner une cohérence à l'ensemble du schéma de champ moyen. Les calculs étant par nature itératifs, les relations opératoriels qu'il est possible d'écrire entre différents états doivent être entendues en perturbations. C'est pourquoi nous mènerons une analyse dans ce cadre avant d'en valider les conclusions par des calculs auto-cohérents.

Chapitre 5

Version perturbative usuelle.

5.1 Hartree-Fock.

Nous débutons avec le traitement HF où l'appariement des nucléons n'est pas considéré. La fonction d'onde HF d'un noyau pair-pair est définie par l'Eq. 4.19. En perturbations, le lien avec l'isotope pair-impair ayant, par exemple, un neutron de plus se fait de façon standard par l'application d'un opérateur de création de particule b_k^\dagger . Lorsque l'on s'intéresse à l'état fondamental, cet opérateur formalise le remplissage d'un des états dégénérés juste au-dessus du niveau de Fermi dans le noyau pair-pair. La fonction d'onde perturbative décrivant le fondamental impair s'écrit donc¹ :

$$|\Phi_n^{HF}(N+1)\rangle = b_n^\dagger |\Phi^{HF}(N)\rangle \quad . \quad (5.1)$$

Au premier ordre des perturbations, le spectre individuel de l'impair reste identique à celui du pair et conserve la dégénérescence de Kramers. La différence en énergie entre les états 5.1 et 4.19 est alors égale à l'énergie individuelle au niveau de Fermi ϵ_n . Aux ordres supérieurs, le spectre individuel $\{\tilde{\epsilon}_k\}$ associé à la fonction d'onde 5.1 brise l'invariance par renversement du temps de telle sorte que la dégénérescence de Kramers est levée. La différence en énergie entre les états HF fondamentaux voisins est légèrement différente dans ce cas. Nous reviendrons sur ce point dans la section 7. Quoi qu'il en soit, l'état perturbatif défini par l'Eq. 5.1 constitue du point de vue qualitatif une bonne approximation de l'état fondamental du noyau impair, puisqu'il présente le bon nombre de nucléons et une différence en énergie réaliste vis à vis du noyau pair dont on est parti.

En conclusion, l'ajout d'un nucléon dans la fonction HF se révèle tout à fait intuitif et l'état d'un noyau impair est parfaitement défini par l'application d'un opérateur de création de particule sur la fonction d'onde du noyau pair voisin. Passons à présent au cas où l'appariement est pris en compte dans la théorie.

¹La différence avec la fonction d'onde auto-cohérente d'un noyau pair-impair (Eq. 4.20) est la conservation de la base à un corps du noyau pair-pair dont on est parti pour écrire l'état perturbatif 5.1.

5.2 Hartree-Fock-Bogolyubov.

Par simplicité, nous faisons l'hypothèse que les bases canoniques de l'état de nombre parité pair et de l'état de nombre parité impair construit dessus sont identiques et définies par le jeu d'opérateurs $\{a_k\}$. L'état fondamental du noyau pair-pair $|\Phi^{HFB}(N)\rangle$ étant défini par l'Eq. 4.44, un état de nombre parité impair construit en perturbation comme un état à une qp sur lui prend la forme :

$$|\Phi_k\rangle = \gamma_k^\dagger |\Phi^{HFB}(N)\rangle . \quad (5.2)$$

Intéressons nous aux caractéristiques de cet état. Le nombre moyen de particules dans la fonction d'onde $|\Phi^{HFB}(N)\rangle$ étant égal à N , il devient égal à $N + u_k^2 - v_k^2$ dans l'état $|\Phi_k\rangle$. Ce nombre moyen n'est donc pas nécessairement égal à $N + 1$ et dépend de la qp γ_k^\dagger créée [40]. Au premier ordre des perturbations², la différence en énergie entre l'état 5.2 et le fondamental du noyau pair-pair est :

$$\begin{aligned} \langle \Phi_k | H | \Phi_k \rangle - \langle \Phi^{HFB}(N) | H | \Phi^{HFB}(N) \rangle &= (u_k^2 - v_k^2) \lambda^N + E_k^N \\ &= \frac{\epsilon_k(\epsilon_k - \lambda^N) + \Delta_k^2}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda^N)^2 + \Delta_k^2}} , \end{aligned} \quad (5.3)$$

où le potentiel chimique λ^N et l'énergie de qp $E_k^N = \sqrt{(\epsilon_k - \lambda^N)^2 + \Delta_k^2}$ écrite à l'approximation BCS³ sont tirés du fondamental pair-pair. Afin de minimiser l'énergie de l'état $|\Phi_k\rangle$, il est logique de sélectionner une qp basse correspondant à un état individuel d'énergie ϵ_k proche de λ^N ($u_k^2 - v_k^2 \approx 0$). La différence en énergie 5.3 est alors approximativement égale à $E_k^N \approx \Delta_k$ et le nombre moyen de particules dans l'état $|\Phi_k\rangle$ reste proche de N . Nous obtenons un mauvais candidat pour décrire le fondamental impair. Afin d'assurer le bon nombre impair de nucléons dans la fonction d'onde, il est nécessaire de créer une qp γ_k^\dagger haute en énergie telle que $\epsilon_k - \lambda^N \gg \Delta_k$ ($u_k^2 - v_k^2 \approx 1$). Dans ce cas, la différence en énergie 5.3 est approximativement donnée par $\epsilon_k \gg \lambda^N$. Une fois encore, l'état 5.2 n'est pas un bon candidat pour décrire l'état fondamental du noyau pair-impair.

Cette analyse simple montre que la fonction d'onde d'un noyau pair-impair ne peut être écrite en perturbation comme un état à une qp sur la fonction d'onde du noyau pair-pair voisin ; une telle écriture ne permet pas d'obtenir des valeurs réalistes de l'énergie de liaison et/ou du nombre moyen de particules.

Afin de contourner ce problème du point de vue de l'énergie, il est possible de prendre artificiellement $u_k^2 - v_k^2 \approx \pm 1$ dans l'Eq. 5.3 (voir Ref. [40], Chap. 6.3.4) tandis qu'une qp telle que $E_k^N \approx \Delta_k$ est sélectionnée. L'écart en énergie devient :

²Comme pour l'état HF 5.1, le spectre de qp associé à l'état 5.2 brise l'invariance par renversement à l'ordre deux des perturbations.

³Avec une force d'appariement monopolaire telle qu'elle est utilisée ici, les énergies de qps d'un système invariant par renversement du temps prennent la forme BCS dans la base canonique.

$$\langle \Phi_k | H | \Phi_k \rangle - \langle \Phi^{HFB}(N) | H | \Phi^{HFB}(N) \rangle \equiv \pm \lambda^N + \Delta_k , \quad (5.4)$$

ce qui est effectivement attendu pour le fondamental impair. Cela dit, cette procédure ne permet pas de calculer d'autres observables telles que les rayons carrés ou les propriétés de déformation, puisque l'état $|\Phi_k\rangle$ n'a pas même le bon nombre de nucléons en moyenne.

5.3 Schéma du problème à N corps.

Évidemment, ce problème ne se pose pas du point de vue des calculs non-perturbatifs dès lors que la fonction d'onde 4.45 est minimisée sous la contrainte d'avoir le bon nombre impair de nucléons en moyenne⁴. Le potentiel chimique est réajusté de manière itérative quel que soit le point de départ du calcul et la fonction d'onde obtenue autorise un calcul satisfaisant des masses et des autres observables.

Malgré ce bon fonctionnement des calculs non-perturbatifs, il est important de corriger les inconsistences formelles de l'écriture perturbative dans le processus d'ajout d'un nucléon. Un résumé du schéma reposant sur l'analyse précédente est donné sur la Fig. 5.1.

Comme nous venons de le montrer, le processus d'ajout d'un nucléon est bien décrit dans le cas de l'appariement nul par l'application d'un opérateur de création de particule. La traduction de ce processus relativement au spectre de particules indépendantes et des occupations associées est schématiquement donnée sur la figure 5.1 aux ordres un et deux de la théorie de perturbation.

Cette description n'est pas conservée lors de l'élargissement de l'espace variationnel depuis l'espace de Hilbert des fonctions produit à N particules vers l'espace des fonctions produit de tout l'espace de Fock. En effet, il n'existe pas d'opérateur à un corps permettant d'écrire la fonction du fondamental impair en perturbation sur celle du voisin pair dans la théorie HFB. Il semble donc y avoir une "discontinuité" dans la description de cette transition en fonction de l'intensité de l'appariement dans le système. Cela est rédhibitoire pour qui veut comprendre la théorie HF comme la limite de la théorie HFB.

Partant de ce constat, nous allons ré-analyser la description de ce processus dans le cadre de la théorie HFB avant d'en étudier la limite d'appariement nul. La réalisation d'un schéma global cohérent procède à la base d'un soucis formel, mais permettra également une meilleure compréhension de la physique contenue dans le processus d'ajout d'un nucléon dans la fonction d'onde du noyau. Nous montrerons entre autres comment cette réalisation jette une lumière nouvelle sur la compréhension des observables différentielles pair-impair.

⁴Le traitement non-perturbatif des noyaux impairs sans la prise en compte de la brisure de l'invariance par renversement du temps consiste à résoudre l'équation du gap BCS pour un nombre pair de particules en excluant la paire d'états associée à la présence du nucléon impair.

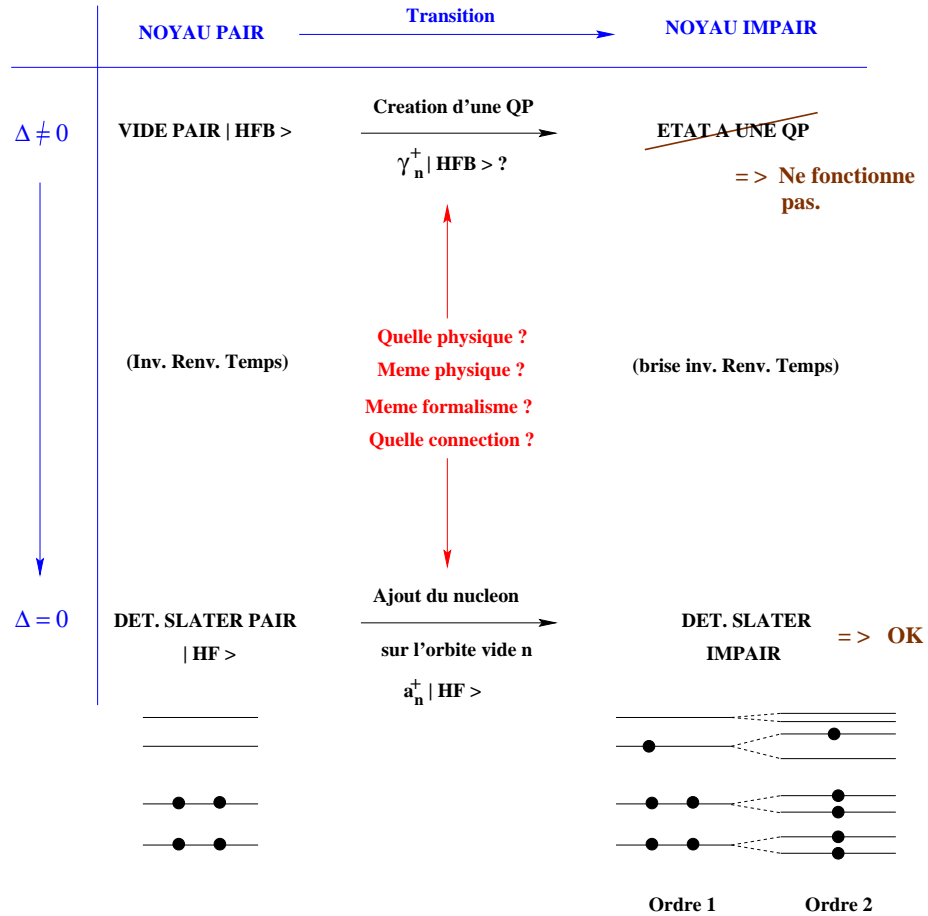


FIG. 5.1 – Étude perturbative du processus d'ajout d'un nucléon dans la fonction d'onde de champ moyen. Les cas avec et sans appariement sont considérés et leur incohérence est soulignée. La traduction du processus vis à vis du spectre de particules indépendantes et des occupations est donnée dans le cas HF à l'ordre un et deux des perturbations. Le fait que le dernier nucléon n'occupe pas l'état de plus basse énergie s'offrant à lui sera discuté plus tard.

Chapitre 6

Version perturbative revisitée.

6.1 Appariement non nul.

Les modifications qu'il convient de faire sont naturelles aux vues des incohérences mises en exergue dans la section 5.2. La création d'une qp favorable du point de vue énergétique s'opposant à l'addition d'un nucléon, il s'ensuit que la qp favorable du point de vue énergétique doit être créée sur un vide ayant déjà le bon nombre de nucléons.

Ainsi, le vide sur lequel il est signifiant de créer une qp pour décrire un système impair en perturbations est l'état de nombre parité pair possédant un nombre moyen impair de particules. Notons cet état $|\Phi^{HFBp}(N+1)\rangle$, où “ p ” signifie qu'il s'agit d'un état de nombre parité *pair*, tandis que “ $N+1$ ” précise le nombre moyen de particules impair¹. Cet état que nous appellerons communément *état impair totalement apparié* est invariant par renversement du temps.

L'état à une qp sur ce nouveau vide de référence correspondant à la qp de plus basse énergie E_n^{N+1} ($u_n^2 - v_n^2 \approx 0$) sera noté $|\Phi_n^{HFB}(N+1)\rangle$. Cet état de nombre parité impair possède le bon nombre impair de nucléons en moyenne, et sa différence en énergie avec le noyau pair voisin est :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_n^{HFB}(N+1) - \mathcal{E}^{HFB}(N) &= \underbrace{\mathcal{E}^{HFBp}(N+1) - \mathcal{E}^{HFBp}(N)} + E_n^{N+1} \\ &\approx \frac{\partial \mathcal{E}^{HFBp}}{\partial N} + E_n^{N+1} . \end{aligned}$$

Cette expression est formellement identique à l'Eq. 5.4. Cependant, la qp est maintenant définie dans l'état de référence $|\Phi^{HFBp}(N+1)\rangle$ et plus aucun ajustement *ad hoc* du potentiel chimique n'est nécessaire. Cette procédure, bien qu'imparfaite du point de vue quantitatif puisque toujours perturbative dans sa seconde phase, offre dans le même temps une bonne approximation de l'énergie et du nombre de nucléons dans la fonction d'onde. Elle résoud donc sur le plan qualitatif l'incohérence qui existait dans la façon

¹Notons que pour un noyau pair, l'indice p est superflu puisque le vrai état HFB est un état de nombre parité pair. Cet indice pourra cependant apparaître explicitement pour ces noyaux lorsque l'on voudra désigner une observable associée aux états de nombre parité pair dans leur ensemble, qu'ils aient un nombre moyen de particules pair ou impair.

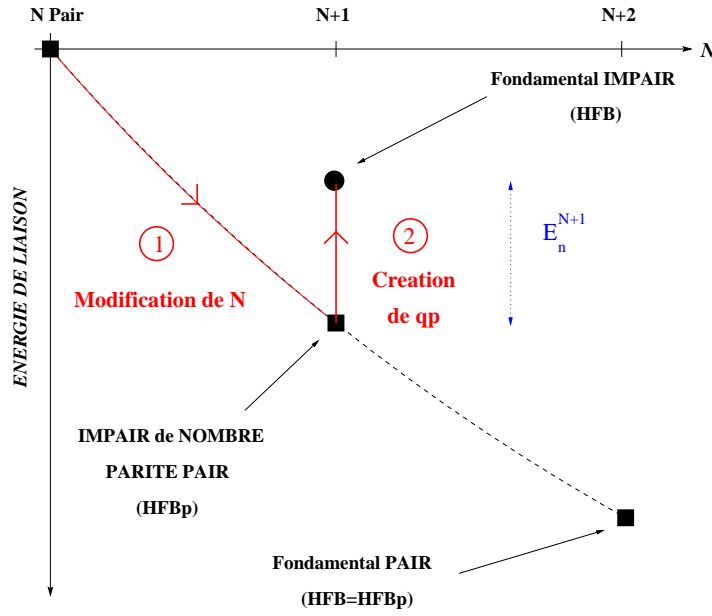


FIG. 6.1 – Représentation schématique de la transition entre un noyau pair-pair et un noyau pair-impair comme un processus en deux étapes. Aucun opérateur proprement défini ne permet de formaliser le passage direct du fondamental pair au fondamental impair. La création de qp est un processus bien défini à nombre de particules constant.

standard de comprendre l'état impair par rapport au pair voisin et $|\Phi_n^{HFB}(N+1)\rangle$ est un bon candidat pour décrire l'état fondamental du noyau impair.

L'état intermédiaire $|\Phi^{HFBp}(N+1)\rangle$ a déjà été introduit par Ring *et. al* [144], et utilisé avec succès par Satula *et. al* [145]. Cependant, son introduction était de l'ordre de la simplicité numérique vis à vis de la création itérative d'une qp lors du calcul d'un noyau impair.

Du point de vue physique, l'introduction d'un vide intermédiaire pour formaliser le passage d'un noyau pair au noyau voisin impair implique la nécessité de comprendre l'addition d'un nucléon comme un processus en deux étapes. L'état intermédiaire procède d'abord au réajustement (non-perturbatif) du potentiel chimique, et donc à une redéfinition appropriée des énergies de qp, sans y mélanger la physique associée à la création de l'une d'entre elles. Ainsi, le nucléon célibataire est *ajouté* dans une structure de nombre parité pair avant d'être *bloqué* à travers la création d'une qp, cette seconde étape modifiant le nombre parité de la fonction d'onde. Il est à noter que la modification du potentiel chimique est très difficile à décrire perturbativement lorsque l'appariement est impliqué dans la description. En effet, la non-linéarité du système constitué de l'équation du gap et de la contrainte sur le nombre de nucléons ne permet pas de préjuger de la modification des occupations individuelles lors de l'ajout d'un nucléon comme c'est le cas dans la théorie HF, et même d'espérer en obtenir une évaluation simple et quantitative au premier ou au second ordre des perturbations. Nous reviendrons sur ce point par la suite. L'apport de la présente analyse par rapport au calcul perturbatif standard ou au calcul auto-cohérent complet des noyaux impairs n'est pas de proposer une vision totalement perturbative qui

fonctionne mais d'identifier, d'une meilleure façon, la physique contenue dans le processus d'ajout d'un nucléon dans la fonction d'onde de champ moyen. La procédure en question est illustrée sur la Fig. 6.1.

6.2 Limite d'appariement nul.

Maintenant que le processus d'ajout d'un nucléon est correctement défini dans la théorie HFB, il est intéressant d'en étudier la limite d'appariement nul afin de constater dans quelle mesure cette description correspond à celle définie intuitivement dans la théorie HF. Les calculs faits selon un passage à la limite rigoureux sont donnés dans l'annexe F. Nous n'écrivons ici que les quantités concernant le système impair puisque la limite de l'état HFB pour un noyau pair ne présente aucune nouveauté.

La limite d'appariement nul de l'état perturbatif impair à une qp est donnée par :

$$|\Phi_n^{HFB}(N+1)\rangle \rightarrow |\Phi_n^{HF}(N+1)\rangle = a_n^\dagger \prod_{l=1}^{n-1=N/2} a_l^\dagger a_l^\dagger |0\rangle, \quad (6.1)$$

tandis que l'état totalement apparié correspondant devient :

$$|\Phi^{HFBp}(N+1)\rangle \rightarrow |\Phi^{HFp}(N+1)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + a_n^\dagger a_{\bar{n}}^\dagger\right) \prod_{l=1}^{n-1=N/2} a_l^\dagger a_l^\dagger |0\rangle. \quad (6.2)$$

On peut alors vérifier :

$$|\Phi_n^{HF}(N+1)\rangle = \gamma_n^\dagger |\Phi^{HFp}(N+1)\rangle, \quad (6.3)$$

où $\gamma_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_n^\dagger - a_{\bar{n}}^\dagger)$ est la limite singulière de l'opérateur associé à la qp la plus basse en énergie dans l'état $|\Phi^{HFBp}(N+1)\rangle^2$. Cette qp possède une énergie nulle à l'ordre un des perturbations (cf. annexe F).

Dans cette limite, le vrai déterminant de Slater impair 6.1 s'écrit donc comme un état à une qp sur un état de nombre parité pair possédant un nombre impair de nucléons en moyenne. Cette vision de l'ajout d'un nucléon dans la fonction d'onde de champ moyen en l'absence d'appariement est différente de la procédure HF habituelle. Cette étude permet donc de montrer que la théorie HF n'est pas la limite d'appariement nul de la théorie HFB. D'ailleurs, l'état $|\Phi^{HFp}(N+1)\rangle$ défini comme la limite du vide de nombre parité pair nouvellement introduit ne peut-être défini dans la théorie HF. En effet, il s'écrit comme une combinaison linéaire de deux déterminants de Slater pairs appartenant à des espaces de Hilbert relatifs à des nombres de particules différents³. Le doublement de la

²Les autres opérateurs de qp $\gamma_k^{(\dagger)}$ ($k \neq n, \bar{n}$) tendent vers les opérateurs habituels de création ou d'annihilation de particules $a_k^{(\dagger)}$.

³À ce titre, la notation HFp peut être trompeuse et faire croire qu'il s'agit d'un simple état HF.

base caractérisant le passage de la théorie HF à la théorie HFB illustré par le passage du spectre de qps b) au spectre de qps c) sur la Fig. 4.1 n'est donc pas anodin, même dans la limite d'appariement nul. En d'autres termes, la seconde transformation de la décomposition de Bloch-Messiah 4.41 associée à un état de nombre parité pair n'est pas triviale dans la limite d'appariement nul lorsqu'un nombre de particules moyen impair est imposé au système.

Finalement, la procédure en deux étapes est parfaitement définie dans la limite d'appariement nul et permet une description cohérente du processus d'ajout d'un nucléon quelle que soit l'intensité de ces corrélations. Le contenu physique de ce processus est d'ailleurs particulièrement bien illustré dans la limite d'appariement nul : le nucléon est *ajouté* dans la fonction de nombre parité pair en augmentant l'occupation des deux premières orbites vides (n, \bar{n}) d'une occupation $1/2^4$. Cette étape préserve l'invariance par renversement du temps dans le système et se trouve être commune aux noyaux pairs et impairs. Dans le cas des systèmes impairs, il faut *spécifier* l'orbite finalement occupée par le nucléon célibataire. Cette seconde étape est toute entière réalisée par la création d'une qp. Ainsi, tandis que la version usuelle suggérerait que ces deux étapes pouvaient être intégrées par la seule création d'une qp, la version proposée ici autorise une meilleure identification de son contenu physique en indiquant qu'elle se fait à nombre de particules constant.

En présence d'appariement, la seule différence réside dans le fait que l'ajout du nucléon dans la structure paire ne se fait plus seulement sur un couple de niveaux dégénérés, mais sur l'ensemble de la mer de Fermi en raison de la diffusion de paire associée à l'interaction résiduelle. L'orbite finalement occupée par le nucléon célibataire est toujours spécifiée par la création d'une qp.

Une remarque peut être faite ici. Les calculs numériques HF des noyaux impairs utilise souvent l'alternative à la fonction d'onde 5.1 consistant à négliger, pour des raisons de simplicité, la brisure de l'invariance par renversement du temps. Cela est fait en remplissant les deux premières orbites vides (n, \bar{n}) avec une occupation $1/2$. D'un point de vue mathématique, le système est décrit dans l'espace de Hilbert à N particules par un *opérateur densité* présentant un mélange statistique équiprobable de l'état 6.1 et de son renversé du temps où l'orbite \bar{n} est occupée. Mis à part l'argument de simplicité, l'approximation de la fonction d'onde impaire par un tel opérateur densité semble relativement ad hoc a priori. Si maintenant on étudie de plus près l'état $|\Phi^{HFp}(N+1)\rangle$, on s'aperçoit qu'il est invariant par renversement du temps et correspond à une occupation $v^2 = 1/2$ des états (n, \bar{n}) . Il lui correspond la même matrice densité à un corps et donc la même énergie que l'état statistique précédemment mentionné⁵. La définition du vide intermédiaire fonde cette approximation standard et en précise le lien avec le vrai état impair à travers la relation 6.3.

⁴On augmente chacune des $2j + 1$ orbites dégénérées d'une occupation $1/(2j + 1)$ dans un noyau sphérique présentant une couche ouverte de moment angulaire j .

⁵L'énergie d'interaction associée aux contractions anormales dans l'état $|\Phi^{HFp}(N+1)\rangle$ est nulle en accord avec la limite d'appariement nul telle qu'elle est explicitée dans l'annexe F.

6.3 Schéma unifié du problème à N corps.

Nous sommes à présent en mesure de modifier le schéma 5.1 et de lui donner une entière cohérence. Cela est illustré sur la Fig. 6.2. Sans répéter ce qui vient d'être dit, il est important de rappeler que la cohérence est valable quelle que soit l'intensité de l'appariement dans le système. Cela autorisera une étude significative des observables différentielles en fonction de l'intensité de ces corrélations.

Notons également que la discontinuité qui apparaissait jusqu'ici entre la théorie HF et la théorie HFB n'a pu être levée qu'au prix de "l'abandon" de la première. Bien que la théorie HF soit tout à fait cohérente en elle-même, une théorie de champ moyen incluant l'appariement, et brisant pour cela la conservation du nombre de particule, ne se réduit pas simplement à elle dans la limite d'appariement nul.

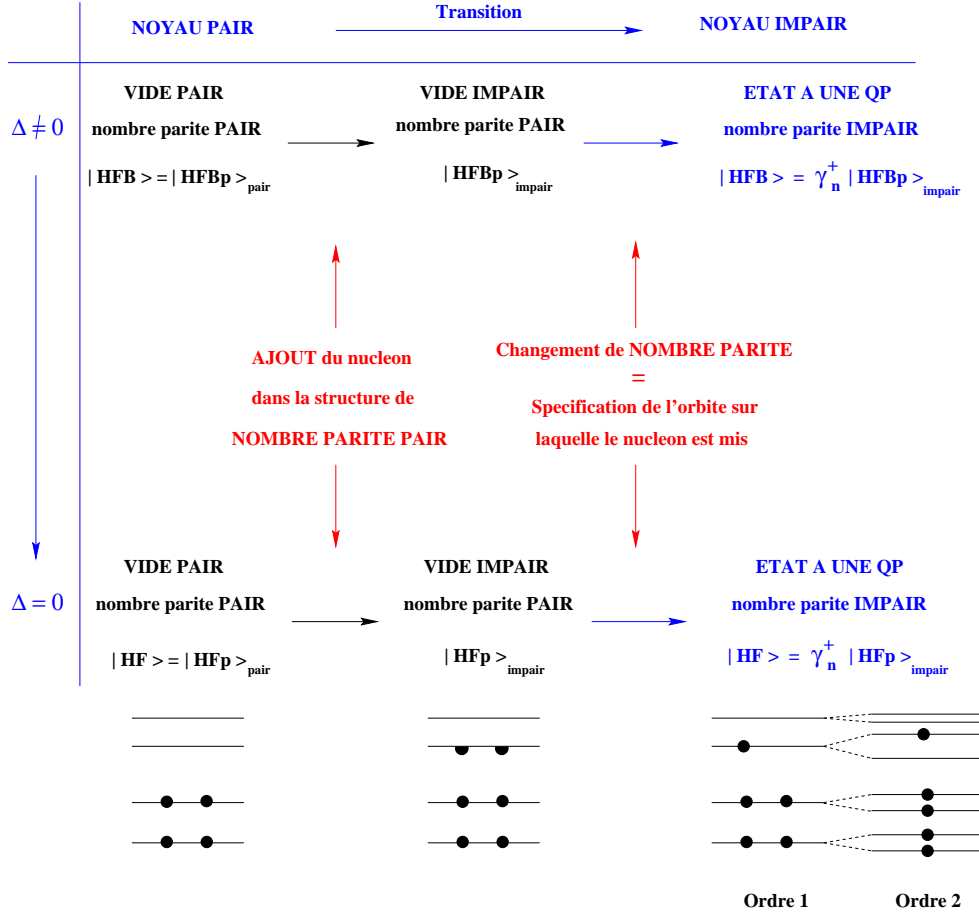


FIG. 6.2 – Schéma revisité illustrant le lien entre un noyau pair et un noyau impair dans les théories de champ moyen. Le passage de l'un à l'autre se fait en deux étapes : l'ajout du nucléon est réalisé dans le sous-espace des fonctions de nombre parité pair, tandis que la spécification de l'orbite occupée par ce nucléon traduit le passage dans l'espace des fonctions de nombre parité impair. Cette image est valable quelque soit l'intensité de l'appariement dans le système. La traduction du processus vis à vis du spectre de particules indépendantes et des occupations est donnée dans le cas HF à l'ordre un et deux des perturbations.

Chapitre 7

Energie de séparation d'un nucléon.

Nous allons maintenant traduire les deux étapes associées au processus d'ajout d'un nucléon du point de vue des énergies. Tandis que nous avons pu nous contenter de définir celles-ci au premier ordre des perturbations pour revisiter le lien entre la fonction de champ moyen décrivant un noyau pair et celle décrivant son voisin impair, nous voulons à présent être plus quantitatifs. Il s'agit de pousser le calcul perturbatif assez loin pour obtenir une approximation simple mais précise des énergies de séparation obtenues par les calculs auto-cohérents. Nous désirons à ce propos déterminer dans quelle mesure les éléments de matrice (ou valeurs propres) des champs h et Δ calculés dans un noyau nous informe sur la différence en énergie avec l'état fondamental du noyau voisin. Bien qu'académique, cette question n'est pas résolue aujourd'hui de façon satisfaisante [146].

7.1 Théorème de Koopmans.

Cette problématique est liée au théorème de Koopmans [70] stipulant l'égalité entre l'énergie de séparation HF et l'énergie de particule indépendante ϵ_n associée à l'orbite dont est extrait le nucléon. Ce théorème se démontre en supposant négligeable le réarrangement des fonctions d'onde individuelles lors du retrait du nucléon. En d'autres termes, l'hypothèse est faite que les fonctions d'onde individuelles sont identiques dans les deux noyaux, négligeant ainsi la polarisation du cœur par le trou dans le noyau fils. Un autre élément important est que le théorème de Koopmans n'a été démontré que dans le cas d'une force indépendante de la densité. Son équivalent dans le cas d'une force dépendante de la densité n'est valable que pour une variation infinitésimale du nombre de particules [98], et prend alors la forme générale du théorème de Hugenholtz et Van Hove [147].

La nécessité déjà discutée d'une dépendance en densité pour la force utilisée au niveau du champ moyen se traduit par un meilleur accord entre les énergies de séparation expérimentales et les énergies individuelles théoriques [148, 40, 68]. Ce constat rend caduque l'utilisation du théorème de Koopmans dans le cadre nucléaire.

Sans avoir détaillé les approximations qui mènent à la dépendance en densité de la force effective, nous avons rappelé dans la section 3.2.5 dans quelle mesure celle-ci peut être rattachée à une resommation de corrélations à deux corps ayant pour principale objectif de renormaliser le cœur dur de l'interaction nue. Lorsque le choix de BHF (voir Eq. 3.20) est fait pour le potentiel à un corps Γ^α , l'analogue du théorème de Koopmans

n'est pas vérifié [149]. En revanche, il se trouve être valable dans le cadre de la théorie de Brueckner-Hartree-Fock *Renormalisée* (RBHF) [88]. Cette approximation revient à prendre en compte la variation de la matrice G^α avec le nombre de nucléons dans la mer de Fermi dans la définition des énergies de particules indépendantes. Il est alors possible de montrer l'équivalence entre les diagrammes inclus dans cette redéfinition du potentiel Γ^α et le potentiel de réarrangement $\Gamma^{p-t, [\rho]}$ apparaissant pour une force dépendante de la densité dans les théories de champ moyen auto-cohérent [87]. Cette équivalence, couplée à la validité du théorème de Koopmans dans la théorie RBHF, fait pressentir la validité d'un théorème analogue pour une variation non-infinitésimale du nombre de particules dans les théories de champ moyen auto-cohérent utilisant une force dépendante de la densité.

7.2 Limite d'appariement nul.

Nous allons maintenant nous pencher sur cette question dans plusieurs cas d'approximations, en portant notre attention sur la contribution à l'énergie de séparation et à la définition des énergies individuelles de la brisure de l'invariance par renversement du temps. Nous commençons cette étude dans le cas d'un appariement nul. Nous allons traduire sur le plan énergétique les liens opératoriels établis dans la section 6.2 entre les fonctions d'onde $|\Phi^{HFp}(N)\rangle$, $|\Phi^{HFp}(N+1)\rangle$ et $|\Phi_n^{HF}(N+1)\rangle$.

Considérons la base qui diagonalise la matrice densité $\bar{\rho}$ et le champ HF \bar{h} associés à l'état de nombre parité pair $|\Phi^{HFp}(N+1)\rangle$. Cette base à un corps est composée de paires d'états renversés du temps (l, \bar{l}) . Dans cette base nous considérons les quantités suivantes :

- $\{\epsilon_l\}$ désigne les valeurs propres du champ HF associé au déterminant de Slater pair $|\Phi^{HFp}(N)\rangle$, tandis que ρ et $v[\rho]$ définissent l'opérateur densité à un corps et l'interaction associés à cet état.
- $\{\bar{\epsilon}_l\}$, $\bar{\rho}$ et $v[\bar{\rho}]$: de même pour l'état $|\Phi^{HFp}(N+1)\rangle$.
- $\{\tilde{\epsilon}_l\}$, $\tilde{\rho}$ et $v[\tilde{\rho}]$: de même pour le vrai déterminant de Slater impair $|\Phi_n^{HF}(N+1)\rangle$.

Reprenant l'hypothèse de Koopmans [70] et Becker *et al.* [88] sur la négligeabilité du réarrangement des fonctions d'onde individuelles entre ces trois états à N corps, les trois opérateurs densité à un corps sont diagonaux dans la base $|l\rangle$ et prennent, d'après les Eq. 4.19, 6.1 et 6.2, la forme :

$$\rho[N] = \sum_{l=1}^{n-1} (|l\rangle\langle l| + |\bar{l}\rangle\langle \bar{l}|) \quad (7.1)$$

$$\bar{\rho}[N+1] = \sum_{l=1}^{n-1} (|l\rangle\langle l| + |\bar{l}\rangle\langle \bar{l}|) + \frac{1}{2} (|n\rangle\langle n| + |\bar{n}\rangle\langle \bar{n}|) \quad (7.2)$$

$$\tilde{\rho}[N+1] = \sum_{l=1}^{n-1} (|l\rangle\langle l| + |\bar{l}\rangle\langle \bar{l}|) + |n\rangle\langle n| .$$

Ecrivons l'énergie de liaison et les énergies individuelles d'un état en fonction de sa matrice densité diagonale ρ' :

$$\mathcal{E}[\rho'] = \sum_i t_i \rho'_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \bar{v}_{ijij}[\rho'] \rho'_i \rho'_j \quad (7.3)$$

$$\epsilon'_k = \frac{\mathcal{E}[\rho']}{\partial \rho'_k} = t_k + \sum_j \bar{v}_{kj kj}[\rho'] \rho'_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\overline{\frac{\partial v}{\partial \rho'_k}} \right)_{ijij} \rho'_i \rho'_j .$$

Considérons alors une variation non-infinitésimale de la matrice densité $\rho = \rho' + \delta\rho'$, mais assez faible pour que son effet sur l'énergie totale puisse être considéré en perturbations. L'énergie associée à cette nouvelle matrice densité s'écrit à l'ordre 2 en $\delta\rho'$:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\rho] &= \sum_i t_i (\rho'_i + \delta\rho'_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \bar{v}_{ijij}(\rho'_i + \delta\rho'_i) (\rho'_j + \delta\rho'_j) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \bar{\delta v}_{ijij}(\rho'_i + 2\delta\rho'_i) \rho'_j + \frac{1}{4} \sum_{i,j} \bar{\delta^2 v}_{ijij} \rho'_i \rho'_j . \end{aligned} \quad (7.4)$$

La variation de l'interaction à l'ordre 2 s'écrit :

$$\begin{aligned} \bar{v}_{ikjl}[\rho] &= \bar{v}_{ikjl}[\rho'] + \bar{\delta v}_{ikjl}[\rho'] + \frac{1}{2} \bar{\delta^2 v}_{ikjl}[\rho'] \\ &= \bar{v}_{ikjl}[\rho'] + \sum_r \left(\overline{\frac{\partial v}{\partial \rho'_r}} \right)_{ikjl} \delta\rho'_r + \frac{1}{2} \sum_{r,r'} \left(\overline{\frac{\partial^2 v}{\partial \rho'_r \partial \rho'_{r'}}} \right)_{ikjl} \delta\rho'_r \delta\rho'_{r'} . \end{aligned} \quad (7.5)$$

La nouvelle énergie individuelle ϵ_k s'obtient par :

$$\epsilon_k = \frac{\partial \mathcal{E}[\rho]}{\partial \rho_k} = \frac{\partial \rho'_k}{\partial \rho_k} \frac{\partial \mathcal{E}[\rho' + \delta \rho']}{\partial \rho'_k} , \quad (7.6)$$

où $\partial \rho'_k / \partial \rho_k = 1$ et où les termes d'ordre 2 en $\delta \rho'$ dans l'énergie ne sont pas dérivés. On obtient dans ces conditions :

$$\begin{aligned} \epsilon_k = & t_k + \sum_i \bar{v}_{ikik}(\rho'_i + \delta \rho'_i) + \sum_i \bar{\delta v}_{ikik} \rho'_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\frac{\partial \delta v}{\partial \rho'_k} \right)_{ijij} \rho'_i \rho'_j \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\frac{\partial v}{\partial \rho'_k} \right)_{ijij} (\rho'_i + 2\delta \rho'_i) \rho'_j . \end{aligned} \quad (7.7)$$

Une manipulation longue mais sans difficulté des Eq. 7.4, 7.5 et 7.7 permet d'obtenir :

$$\boxed{\mathcal{E}[\rho] - \mathcal{E}[\rho'] = \sum_k \frac{\epsilon_k + \epsilon'_k}{2} \delta \rho'_k} , \quad (7.8)$$

7.2.1 Ordre 2 en $\delta \bar{\rho}$: ajout du nucléon.

Nous allons spécifier ces équations pour la variation de densité correspondant à l'ajout du nucléon dans la structure de nombre parité pair. Notre point de référence est l'état impair $|\Phi^{HFp}(N+1)\rangle$ auquel nous avons associé la matrice densité $\bar{\rho}$.

La variation de matrice densité considérée $\rho = \bar{\rho} + \delta \bar{\rho}$ permet de passer de cet état à l'état pair ayant un nucléon de moins $|\Phi^{HFp}(N)\rangle$. La variation 7.5 correspondante des éléments de matrice de l'interaction s'écrit¹ :

$$\bar{v}_{ikjl}[\rho] = \bar{v}_{ikjl}[\bar{\rho}] + \left(\frac{\partial v}{\partial \bar{\rho}_n} \right)_{ikjl} (\delta \bar{\rho}_n + \delta \bar{\rho}_{\bar{n}}) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial \bar{\rho}_n^2} \right)_{ikjl} (\delta \bar{\rho}_n + \delta \bar{\rho}_{\bar{n}})^2 , \quad (7.9)$$

où $\delta \bar{\rho}_n = \delta \bar{\rho}_{\bar{n}} = -1/2$ d'après les équations 7.1. L'Eq. 7.8 donne alors directement :

$$\boxed{\mathcal{E}^{HFp}[\bar{\rho}] - \mathcal{E}^{HFp}[\rho] = \frac{\bar{\epsilon}_n + \epsilon_n}{2}} , \quad (7.10)$$

où les dégénérescences de Kramers, $\bar{\epsilon}_n = \bar{\epsilon}_{\bar{n}}$ et $\epsilon_n = \epsilon_{\bar{n}}$, ont été utilisées. L'Eq. 7.7 précise ensuite :

¹ Les formules dérivées dans la suite utilisent des identités portant sur les éléments de matrice de la force et de ses dérivées par rapport à la densité démontrées dans l'annexe G.

$$\begin{aligned}
\bar{\epsilon}_k - \epsilon_k &= \frac{1}{2} (\bar{v}_{knkn} + \bar{v}_{k\bar{n}k\bar{n}}) + \sum_j \left\{ \left(\frac{\partial v}{\partial \bar{\rho}_n} \right)_{kj kj} + \left(\frac{\partial v}{\partial \bar{\rho}_k} \right)_{nj nj} \right\} \bar{\rho}_j \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial \bar{\rho}_k \partial \bar{\rho}_n} \right)_{ij ij} \bar{\rho}_i \bar{\rho}_j .
\end{aligned} \tag{7.11}$$

L'Eq. 7.10 fournit une généralisation du théorème de Koopmans dans le cas des forces dépendantes de la densité, mais en l'absence de brisure de l'invariance par renversement du temps dans l'état décrivant le noyau impair. Ce résultat montre que l'énergie de séparation à l'ordre 2 en la variation de densité nécessite la connaissance des énergies de particules indépendantes des deux noyaux impliqués.

7.2.2 Ordre 2 en $\delta\bar{\rho}$: création d'une quasi-particule.

Passons à présent à la contribution de la brisure de l'invariance par renversement du temps à l'énergie du noyau impair et aux énergies individuelles associées. Cet effet est, selon le schéma de la transition pair-impair développé précédemment, entièrement contenu dans le processus de création de qp qui lie les états $|\Phi^{HFp}(N+1)\rangle$ et $|\Phi_n^{HF}(N+1)\rangle$.

D'après les équations 7.2, les seules variations non nulles des éléments de la matrice densité sont données dans ce cas par $\delta\bar{\rho}_n = -\delta\bar{\rho}_{\bar{n}} = 1/2$. D'après l'Eq. 7.9, cette variation de densité ne modifie pas l'interaction au second ordre des perturbations :

$$\bar{v}_{ikjl}[\bar{\rho}] = \bar{v}_{ikjl}[\bar{\rho}] \quad . \tag{7.12}$$

Utilisant les Eq. 7.7 et 7.12, les énergies individuelles dans l'état $|\Phi_n^{HF}(N+1)\rangle$ se développent à l'ordre 2 en $\delta\bar{\rho}$ sous la forme :

$$\tilde{\epsilon}_k = \bar{\epsilon}_k + \frac{1}{2} (\bar{v}_{knkn} - \bar{v}_{k\bar{n}k\bar{n}}) \quad , \tag{7.13}$$

ce qui, appliqué à $k = n$ et à $k = \bar{n}$, permet d'obtenir :

$$\tilde{\epsilon}_n - \tilde{\epsilon}_{\bar{n}} = -\bar{v}_{n\bar{n}n\bar{n}} \tag{7.14}$$

$$\tilde{\epsilon}_n + \tilde{\epsilon}_{\bar{n}} = 2\bar{\epsilon}_n \quad ,$$

où la dégénérescence de Kramers $\bar{\epsilon}_n = \bar{\epsilon}_{\bar{n}}$ a été utilisée. La première de ces deux équations montre que la levée de la dégénérescence de Kramers entre les états individuels (n, \bar{n}) associés à la qp créée dans le vrai état fondamental impair s'exprime simplement en fonction de l'élément de matrice caractérisant leur auto-interaction dans le canal p-t. Dans le cas où celle-ci est attractive, l'orbite occupée n est plus haute en énergie que

sa partenaire vide \bar{n} . Cela donne un sens à l'occupation des états représentée sur les Fig. 5.1 et 6.2. La seconde équation indique que cette levée de dégénérescence se fait symétriquement vis à vis des énergies individuelles $\bar{\epsilon}_n = \bar{\epsilon}_{\bar{n}}$ qui leur correspondent dans l'état $|\Phi^{HFp}(N+1)\rangle$. Ce résultat peut se démontrer pour tout couple (k, \bar{k}) à partir de l'Eq. 7.13.

Ainsi, la contribution de la création de qp à l'énergie du noyau impair s'écrit en vertu de l'Eq. 7.8 :

$$\boxed{\mathcal{E}^{HF}[\tilde{\rho}] - \mathcal{E}^{HFp}[\tilde{\rho}] = \frac{\tilde{\epsilon}_n - \tilde{\epsilon}_{\bar{n}}}{4}} . \quad (7.15)$$

Cette dernière équation prouve que l'effet de la brisure de l'invariance par renversement du temps sur l'énergie du noyau impair à la limite d'appariement nul est simplement lié à la levée de dégénérescence $\tilde{\epsilon}_n - \tilde{\epsilon}_{\bar{n}}$.

Combinons maintenant les Eq. 7.15 et 7.10 pour inclure l'effet de cette brisure de symétrie sur l'énergie de séparation d'un nucléon. Cela fournit une nouvelle généralisation du théorème de Koopmans sous la forme :

$$\boxed{\mathcal{E}^{HF}[\tilde{\rho}] - \mathcal{E}^{HFp}[\rho] = \frac{\tilde{\epsilon}_n + \epsilon_n}{2}} . \quad (7.16)$$

Celle-ci est formellement identique à l'Eq. 7.10, sauf que l'énergie individuelle $\bar{\epsilon}_n$ calculée dans l'état de nombre parité pair est remplacée par l'énergie $\tilde{\epsilon}_n$ incluant l'effet de la brisure de symétrie. De nouveau, l'énergie de séparation obtenue requiert la connaissance des spectres de particules indépendantes associés aux états décrivant les deux noyaux impliqués.

7.2.3 Réduction à l'ordre 1 en $\delta\bar{\rho}$.

Afin de comprendre dans quelle mesure les différents effets interviennent, nous reprenons les calculs à l'ordre 1 en $\delta\bar{\rho}$. Ceux-ci se font selon le même schéma que précédemment et nous nous contentons ici d'en donner les résultats. Les énergies individuelles sont telles que :

$$\tilde{\epsilon}_k = \bar{\epsilon}_k = \epsilon_k \quad \forall k , \quad (7.17)$$

tandis que les différences en énergie correspondant aux Eq. 7.10 et 7.15 deviennent respectivement :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{HFp}[\tilde{\rho}] - \mathcal{E}^{HFp}[\rho] &= \bar{\epsilon}_n = \epsilon_n \\ \mathcal{E}^{HF}[\tilde{\rho}] - \mathcal{E}^{HFp}[\tilde{\rho}] &= 0 . \end{aligned} \quad (7.18)$$

Ce résultat montre que la stricte généralisation du théorème de Koopmans au cas d'une force dépendante de la densité apparaît au premier ordre des perturbations, tandis que les résultats des sections 7.2.2 et 7.2.1 concernent un ordre supérieur. En effet, on obtient ici l'égalité entre l'énergie de séparation et l'énergie de particule indépendante du nucléon extrait. Le spectre de particules indépendantes d'un noyau ne nous informe donc sur l'énergie du noyau voisin qu'à l'ordre le plus bas de la théorie de perturbation. Nous retrouvons également ici le fait que la brisure de l'invariance par renversement du temps a un effet nul sur les énergies individuelles et sur l'énergie totale à l'ordre le plus bas de la théorie de perturbation (voir une autre démonstration dans l'annexe F).

7.3 Prise en compte des corrélations d'appariement.

Reprenons maintenant les calculs en incluant les corrélations d'appariement. Plaçons-nous dans la base canonique (l, \bar{l}) de l'état de nombre parité pair $|\Phi^{HFBp}(N+1)\rangle$. Celle-ci est stable sous l'opération de renversement du temps, elle diagonalise la matrice densité $\bar{\rho}$ et met le tenseur d'appariement $\bar{\kappa}$ sous forme canonique. Considérons dans cette base les quantités suivantes :

- Les $\{\epsilon_l\}$ désignent les valeurs diagonales du champ HF associé à l'état $|\Phi^{HFBp}(N)\rangle$, tandis que ρ , κ et $\bar{v}[\rho]$ définissent l'opérateur densité à un corps, le tenseur d'appariement et l'interaction associés à cet état.
- $\{\bar{\epsilon}_l\}$, $\bar{\rho}$, $\bar{\kappa}$ et $\bar{v}[\bar{\rho}]$: de même pour l'état $|\Phi^{HFBp}(N+1)\rangle$.
- $\{\tilde{\epsilon}_l\}$, $\tilde{\rho}$, $\tilde{\kappa}$ et $\bar{v}[\tilde{\rho}]$: de même pour l'état $|\Phi_n^{HFB}(N+1)\rangle$.

Écrivons dans cette base l'énergie de liaison et les champs d'un état en fonction de sa matrice densité ρ' et de son tenseur d'appariement κ'^2 :

²Dans la suite, κ_i et Δ_i désignent les éléments de matrice $\kappa_{i\bar{i}}$ et $\Delta_{\bar{i}i}$ respectivement.

$$\mathcal{E} [\rho', \kappa', \kappa'^*] = \mathcal{E}^{p-t} [\rho'] + \mathcal{E}^{p-p} [\rho', \kappa', \kappa'^*] \quad (7.19)$$

$$= \sum_i t_i \rho'_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \bar{v}_{ijij} [\rho'] \rho'_i \rho'_j + \sum_{i,j>0} \bar{v}_{i\bar{i}j\bar{j}} [\rho'] \kappa'^*_i \kappa'_j$$

$$\begin{aligned} \epsilon'_k &= \frac{\mathcal{E}^{p-t} [\rho']}{\partial \rho'_k} = t_k + \sum_j \bar{v}_{kj kj} [\rho'] \rho'_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\frac{\partial v}{\partial \rho'_k} \right)_{ijij} \rho'_i \rho'_j \\ &\quad + \sum_{i,j>0} \left(\frac{\partial v}{\partial \rho'_k} \right)_{i\bar{i}j\bar{j}} \kappa'^*_i \kappa'_j \end{aligned} \quad (7.20)$$

$$\Delta'_k = - \frac{\mathcal{E}^{p-p} [\rho', \kappa', \kappa'^*]}{\partial \kappa'^*_k} = - \sum_{j>0} \bar{v}_{k\bar{k}j\bar{j}} [\rho'] \kappa'_j .$$

Considérons alors une variation non-infinitésimale de la densité généralisée $\rho = \rho' + \delta\rho'$, $\kappa = \kappa' + \delta\kappa'$ et $\kappa^* = \kappa'^* + \delta\kappa'^*$, mais assez faible pour que l'effet puisse être considéré en perturbations. L'énergie p-t associée à ρ est formellement identique à celle donnée par l'Eq 7.4. L'énergie dans le canal p-p s'écrit à l'ordre 2 en $(\delta\rho', \delta\kappa', \delta\kappa'^*)$ sous la forme :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{p-p} [\rho, \kappa, \kappa^*] &= \sum_{i,j>0} \left(\bar{v}_{i\bar{i}j\bar{j}} + \overline{\delta v}_{i\bar{i}j\bar{j}} + \frac{1}{2} \overline{\delta^2 v}_{i\bar{i}j\bar{j}} \right) \kappa'^*_i \kappa'_j \\ &\quad + \sum_{i,j>0} (\bar{v}_{i\bar{i}j\bar{j}} + \overline{\delta v}_{i\bar{i}j\bar{j}}) (\kappa'^*_i \delta\kappa'_j + \kappa'_j \delta\kappa'^*_i) \\ &\quad + \sum_{i,j>0} \bar{v}_{i\bar{i}j\bar{j}} \delta\kappa'^*_i \delta\kappa'_j , \end{aligned} \quad (7.21)$$

tandis que les éléments de matrice diagonaux du champ h sont :

$$\epsilon_k = \frac{\partial \mathcal{E} [\rho, \kappa, \kappa^*]}{\partial \rho_k} = \frac{\partial \rho'_k}{\partial \rho_k} \frac{\partial \mathcal{E} [\rho' + \delta\rho', \kappa' + \delta\kappa', \kappa'^* + \delta\kappa'^*]}{\partial \rho'_k} , \quad (7.22)$$

où $\partial \rho'_k / \partial \rho_k = 1$, et où les termes d'ordre 2 en $(\delta\rho', \delta\kappa', \delta\kappa'^*)$ ne sont pas dérivés. On obtient dans ces conditions :

$$\begin{aligned}
\epsilon_k &= t_k + \sum_i \bar{v}_{ikik}(\rho'_i + \delta\rho'_i) + \sum_i \bar{\delta v}_{ikik}\rho'_i \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\frac{\partial v}{\partial \rho'_k} \right)_{ijij} (\rho'_i + 2\delta\rho'_i) \rho'_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k'} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial \rho'_k \partial \rho'_{k'}} \right)_{ijij} \rho'_i \rho'_j \delta\rho'_{k'} \\
&+ \sum_{i,j>0} \left(\frac{\partial v}{\partial \rho'_k} \right)_{i\bar{i}j\bar{j}} \kappa'_i{}^* \kappa'_j + \sum_{i,j>0,k'} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial \rho'_k \partial \rho'_{k'}} \right)_{i\bar{i}j\bar{j}} \kappa'_i{}^* \kappa'_j \delta\rho'_{k'} \\
&+ \sum_{i,j>0} \left(\frac{\partial v}{\partial \rho'_k} \right)_{i\bar{i}j\bar{j}} \left(\kappa'_i{}^* \delta\kappa'_j + \kappa'_j \delta\kappa'_i{}^* \right) .
\end{aligned} \tag{7.23}$$

De la même façon, les éléments de matrice du champ Δ sont :

$$\Delta_k = -\frac{\partial \mathcal{E}^{p-p}[\rho, \kappa, \kappa^*]}{\partial \kappa_k^*} = -\frac{\partial \kappa'_k{}^*}{\partial \kappa_k^*} \frac{\partial \mathcal{E}^{p-p}[\rho' + \delta\rho', \kappa' + \delta\kappa', \kappa'^* + \delta\kappa'^*]}{\partial \kappa'_k{}^*} , \tag{7.24}$$

où $\partial \kappa'_k{}^* / \partial \kappa_k^* = 1$, et où les termes d'ordre 2 en $(\delta\rho', \delta\kappa', \delta\kappa'^*)$ ne sont pas dérivés. On obtient dans les mêmes conditions :

$$\Delta_k = -\sum_{j>0} \bar{v}_{k\bar{k}j\bar{j}} (\kappa'_j + \delta\kappa'_j) - \sum_{j>0,k'} \left(\frac{\partial v}{\partial \rho'_{k'}} \right)_{k\bar{k}j\bar{j}} \kappa'_j \delta\rho'_{k'} . \tag{7.25}$$

Après une manipulation longue mais sans difficulté des Eq. 7.4, 7.19-7.21, 7.23 et 7.25 utilisant le fait que les éléments de matrice $\Delta'_{\bar{k}k}$, $\Delta_{\bar{k}k}$, $\kappa'_{k\bar{k}}$ et $\kappa_{k\bar{k}}$ peuvent être pris réels dans la base canonique, on obtient finalement :

$$\boxed{\mathcal{E}[\rho, \kappa, \kappa^*] - \mathcal{E}[\rho', \kappa', \kappa'^*] = \sum_k \frac{\epsilon_k + \epsilon'_k}{2} \delta\rho'_k - \sum_{k>0} (\Delta'_k + \Delta_k) \delta\kappa'_k} . \tag{7.26}$$

7.3.1 Ordre 2 en $(\delta\bar{\rho}, \delta\bar{\kappa}, \delta\bar{\kappa}^*)$: ajout du nucléon.

En présence d'appariement, il n'est pas possible de traiter l'ajout du nucléon en perturbation de manière simple. L'impossibilité de relier perturbativement les états HFBp ayant un nombre de nucléons différents par un opérateur correctement défini fait que la variation des éléments de matrice $\delta\bar{\rho}_k$, $\delta\bar{\kappa}_k$ et $\delta\bar{\kappa}_k^*$ n'est pas connue *a priori*. À la limite d'appariement nul, le remplissage des orbitales HF devient simple et autorise cette définition *a priori* des variations de $\delta\bar{\rho}_k$ pour chaque orbite. Dans le cas présent, l'ajout du nucléon se traduit par une modification cohérente mais non-linéaire de ces éléments de matrice à travers la minimisation sous contrainte, où seule la modification globale $2 \sum_{k>0} \delta\bar{\rho}_k = -1$ est connue. Ainsi, il n'est pas aisé d'utiliser la formule perturbative 7.26 dans ce cas et c'est pourquoi nous n'avons pu établir d'approximation simple de l'énergie associée à l'ajout du nucléon en fonction des seuls éléments de matrice des champs \bar{h} , $\bar{\Delta}$, h et Δ .

7.3.2 Ordre 2 en $(\delta\bar{\rho}, \delta\bar{\kappa}, \delta\bar{\kappa}^*)$: création d'une quasi-particule.

En revanche, la modification de la matrice densité et du tenseur d'appariement associée au processus de création de qp est connue et caractérisée par l'Eq. 4.50. Afin d'être utilisable de manière simple, nous nous plaçons, comme cela a déjà été le cas, dans l'hypothèse où la base canonique associée en perturbation à l'état $|\Phi_n^{HFB}(N+1)\rangle$ est identique à celle de l'état $|\Phi^{HFBp}(N+1)\rangle$ (hypothèse valable si la troisième transformation de la décomposition de Bloch-Messiah pour l'état de nombre parité pair totalement apparié est triviale). L'Eq. 4.50 traduite dans cette base pour la qp $\bar{\gamma}_n^\dagger$ donne :

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_k &= \bar{\rho}_k + \delta_{kn}(1 - \bar{\rho}_n) \quad , \quad \tilde{\rho}_{\bar{k}} = \bar{\rho}_{\bar{k}} - \delta_{kn}\bar{\rho}_{\bar{n}} \quad , \\ \tilde{\kappa}_{k\bar{k}} &= \bar{\kappa}_{k\bar{k}} - \delta_{kn}\bar{\kappa}_{n\bar{n}} \quad , \quad \tilde{\kappa}_{\bar{k}k} = \bar{\kappa}_{\bar{k}k} - \delta_{kn}\bar{\kappa}_{\bar{n}n} \quad ,\end{aligned}\tag{7.27}$$

avec $\bar{\rho}_k = \bar{\rho}_{\bar{k}} = \bar{v}_k^2$, $\bar{\kappa}_{k\bar{k}} = -\bar{\kappa}_{\bar{k}k} = \bar{u}_k\bar{v}_k$. Afin de réaliser une création de qp à nombre de particules constant et de créer la qp la plus favorable énergétiquement, nous nous plaçons dans le cas idéal où γ_n^\dagger est telle que $\bar{u}_n = \bar{v}_n = 1/\sqrt{2}$.

Les variations de densité deviennent alors $\delta\bar{\rho}_k = -\delta\bar{\rho}_{\bar{k}} = \delta_{kn}/2$, $\delta\bar{\kappa}_{k\bar{k}} = -\delta\bar{\kappa}_{\bar{k}k} = -\delta_{kn}/2$. Cela donne, comme dans la limite d'appariement nul :

$$\bar{v}_{ijkl}[\tilde{\rho}] = \bar{v}_{ijkl}[\bar{\rho}] \quad .\tag{7.28}$$

Utilisant les équations 7.20, 7.23, 7.24 et 7.26, nous obtenons :

$$\boxed{\mathcal{E}^{HFB}[\tilde{\rho}, \tilde{\kappa}, \tilde{\kappa}^*] - \mathcal{E}^{HFBp}[\bar{\rho}, \bar{\kappa}, \bar{\kappa}^*] = \frac{\tilde{\epsilon}_n - \tilde{\epsilon}_{\bar{n}}}{4} + \frac{\bar{\Delta}_n + \tilde{\Delta}_n}{2}} \quad ,\tag{7.29}$$

avec

$$\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_{\bar{k}} = \frac{\bar{v}_{knkn} - \bar{v}_{k\bar{n}k\bar{n}}}{2}\tag{7.30}$$

$$\tilde{\Delta}_k - \bar{\Delta}_k = \bar{v}_{k\bar{k}n\bar{n}} \quad ,\tag{7.31}$$

ce qui permet la ré-écriture de l'Eq. 7.29 sous la forme :

$$\mathcal{E}^{HFB}[\tilde{\rho}, \tilde{\kappa}, \tilde{\kappa}^*] - \mathcal{E}^{HFBp}[\bar{\rho}, \bar{\kappa}, \bar{\kappa}^*] = \bar{\Delta}_n - \frac{\tilde{\epsilon}_n - \tilde{\epsilon}_{\bar{n}}}{4} = \tilde{\Delta}_n + 3\frac{\tilde{\epsilon}_n - \tilde{\epsilon}_{\bar{n}}}{4} \quad .\tag{7.32}$$

Ces résultats expriment l'effet de la création de qp sur l'énergie totale, les énergies individuelles et les gaps d'appariement à l'ordre 2 des perturbations.

Le premier terme du membre de droite de l'Eq. 7.29 montre que la contribution de la brisure de l'invariance par renversement du temps, et donc la levée de dégénérescence de

Kramers 7.30 associée, est formellement identique à celle dérivée dans la limite d'appariement nul. Cependant, il ne faut pas oublier que la qp bloquée (la plus basse en énergie) n'est pas nécessairement la même dans les deux cas. En fait, même si la qp bloquée est caractérisée par les mêmes nombres quantiques, les fonctions d'ondes individuelles associées ϕ_n et $\phi_{\bar{n}}$ déterminant l'élément de matrice $\bar{v}_{n\bar{n}n\bar{n}}$ ont toutes les chances d'être quantitativement différentes dans les deux situations. Ainsi, l'effet de la brisure de l'invariance par renversement du temps sur les caractéristiques d'un noyau impair pourra différer selon que les corrélations d'appariement sont ou non incluses dans la description du système.

Le second terme du membre de droite de l'Eq. 7.29 traduit l'effet du non-appariement du nucléon célibataire sur l'énergie totale du noyau impair. Cet effet fait intervenir la moyenne arithmétique des gaps HFB définis dans l'état de nombre parité pair totalement apparié d'une part et dans l'état de nombre parité impair d'autre part, traduisant ainsi le processus de blocage de l'appariement lié à ce non-appariement du nucléon célibataire. Ce blocage engendre une réduction des corrélations de toutes les paires comme cela est exprimé par l'Eq. 7.31.

Enfin, l'Eq. 7.32 réorganise³ les contributions de ces deux effets de manière à montrer que l'énergie associée à la création de la qp la plus basse est inférieure (resp. supérieure) au gap HFB lorsque celui-ci est défini dans l'état initial de nombre parité pair (resp. dans l'état final de nombre parité impair)⁴.

7.3.3 Réduction à l'ordre 1 en $(\delta\bar{\rho}, \delta\bar{\kappa}, \delta\bar{\kappa}^*)$.

La réduction à l'ordre un du processus de création de qp aboutit naturellement aux équations :

$$\tilde{\epsilon}_k = \bar{\epsilon}_{\bar{k}} \quad (7.33)$$

$$\tilde{\Delta}_k = \bar{\Delta}_{\bar{k}} \quad , \quad (7.34)$$

qui donnent :

$$\mathcal{E}^{HFB}[\tilde{\rho}, \tilde{\kappa}, \tilde{\kappa}^*] - \mathcal{E}^{HFBp}[\bar{\rho}, \bar{\kappa}, \bar{\kappa}^*] = \bar{\Delta}_n \quad , \quad (7.35)$$

traduisant le non-appariement du nucléon célibataire sans effet de blocage ni de brisure de l'invariance par renversement du temps. En conclusion de la partie 7, nous constatons que la connaissance du seul spectre de (quasi-)particules indépendantes d'un noyau ne suffit pas pour nous renseigner précisément sur les propriétés du noyau voisin. En effet, l'énergie de séparation fait intervenir les valeurs des champs h et Δ des deux noyaux impliqués dès l'ordre 2 des perturbations.

³Cette ré-écriture nécessite en toute rigueur d'avoir la même force dans les canaux p-t et p-p, ce qui n'est pas le cas des calculs auto-cohérents que nous présenterons dans la suite puisque nous utiliserons une force de Skyrme complétée d'une force d'appariement différente.

⁴Cela nécessite que l'élément de matrice $\bar{v}_{n\bar{n}n\bar{n}}$ soit négatif

Chapitre 8

Calculs auto-cohérents [39].

Le schéma développé ainsi que l'ensemble des formules d'approximations dérivées dans les précédentes sections vont être testés à la limite non-perturbative à travers une série de calculs auto-cohérents. Nous allons tout d'abord montrer comment la séparation initialement formelle du processus d'ajout d'un nucléon en deux étapes se traduit concrètement dans la structure des noyaux impairs et en autorise une meilleure compréhension. Cette comparaison permettra ensuite de conclure quant à l'hypothèse principale faite dans les calculs perturbatifs, à savoir la négligeabilité du réarrangement des fonctions d'onde individuelles lors de l'ajout d'un nucléon et de la création d'une qp. Enfin, elle permettra de conclure sur la validité et l'utilité de chacune des formules d'approximations dérivées précédemment.

8.1 Traduction du schéma pour les calculs auto-cohérents.

La prise en compte de la brisure de l'invariance par renversement du temps et de l'effet de blocage de l'appariement rend nécessaire le calcul auto-cohérent de l'état impair selon la méthode HFB. L'Eq. 6.1 traduisant l'ajout du nucléon en perturbations selon un processus en deux étapes est remplacée dans ce cas par :

$$\begin{aligned}\mathcal{E}^{HFB}(N) &= \mathcal{E}^{HFBp}(N) + [\mathcal{E}^{HFB}(N) - \mathcal{E}^{HFBp}(N)] \\ &= \mathcal{E}^{HFBp}(N) + \overbrace{E^{pol}(N) + \Delta(N)} \quad ,\end{aligned}\tag{8.1}$$

où chaque état est calculé de manière itérative. La notation HFBp se réfère aux états totalement appariés de nombre de particules quelconque tandis que $\mathcal{E}^{HFB}(N) - \mathcal{E}^{HFBp}(N)$ définit l'énergie de qp non-perturbative à comparer à son équivalent, E_k^{N+1} , au premier ordre des perturbations. Elle est évidemment nulle pour N pair. Cette énergie de qp auto-cohérente est formellement décomposée en deux contributions dans l'Eq. 8.1. Tout d'abord, $\Delta(N)$ traduit l'effet net sur l'appariement de la présence du nucléon célibataire. Ensuite, $E^{pol}(N)$ désigne la contribution à l'énergie de liaison d'un noyau impair provenant de la brisure de l'invariance par renversement du temps. Cette brisure trouve son

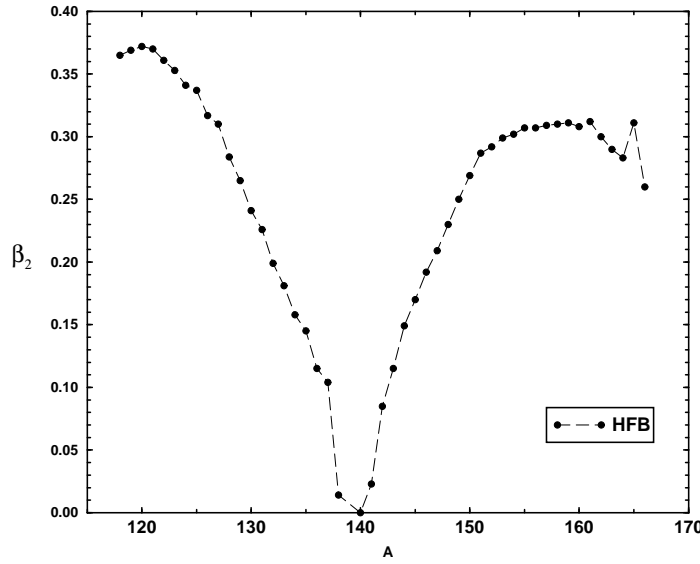


FIG. 8.1 – Paramètre de déformation quadrupolaire axiale $\beta_2 = \sqrt{\frac{\pi}{5}} \frac{\langle Q_{20} \rangle}{A \langle r^2 \rangle}$ des états HFB entre le ^{118}Ce et le ^{166}Ce .

origine dans la spécification de l'orbite occupée par le nucléon impair qui produit une densité de spin et des courants non-nuls dans le système (voir annexe E). $E^{pol}(N)$ inclue également pour partie l'effet de polarisation-déformation du cœur pair-pair induit par les composantes multipolaires non-nulles de la densité du nucléon impair.

Enfin, nous définissons dans la suite les états HFp et HF comme la limite auto-cohérente d'appariement nul des états HFBp et HFB.

8.2 Validation quantitative du schéma.

Nous appliquons la décomposition de l'énergie de liaison d'un noyau impair à une ligne isotopique de noyaux de cérium, depuis le ^{118}Ce jusqu'au ^{166}Ce . Notre but est de déterminer dans quelle mesure cette décomposition permet de mettre en relief le découplage effectif des deux composantes du processus d'ajout d'un nucléon. Chaque noyau impair est calculé quatre fois : d'abord comme l'état de nombre parité pair de plus basse énergie (état HF(B)p)¹, puis comme l'état auto-cohérent de nombre parité impair (état HF(B)) de plus basse énergie décrivant le vrai fondamental. Nous rappelons que tous les calculs rapportés incluent la prescription de Lipkin-Nogami. Les noyaux de cérium ont été choisis à la fois pour leur masse intermédiaire et pour l'évolution régulière de leur déformation quadrupolaire axiale le long de la ligne isotopique, depuis la sphéricité jusqu'à de grandes déformations comme le montre la Fig. 8.1.

La Fig. 8.2 compare l'évolution du potentiel chimique neutron en fonction de la masse,

¹Les parenthèses dans les notations HF(B)p et HF(B) signifient que la proposition correspondante est valable à la fois pour un appariement réaliste et dans la limite d'appariement nul. De la même manière, les parenthèses dans les notations HFB(p) et HF(p) signifient que la proposition correspondante est valable pour l'état de nombre parité pair totalement apparié et pour le vrai état fondamental.

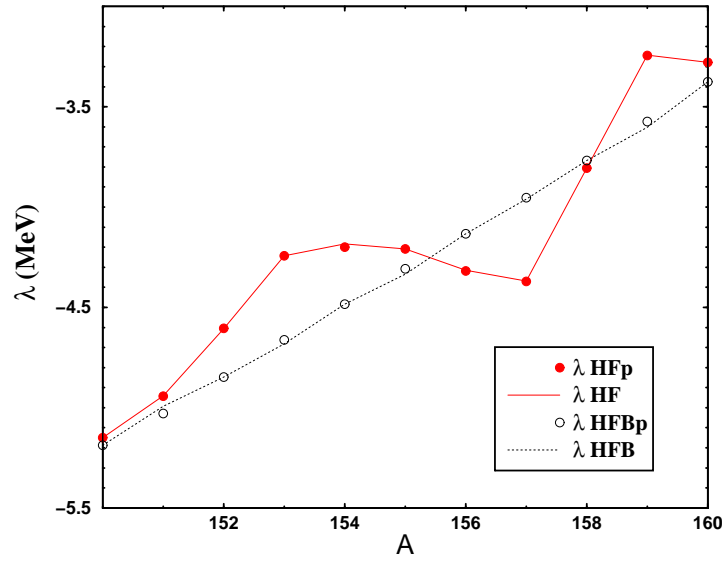


FIG. 8.2 – Potentiel chimique le long de la ligne isotopique des noyaux de cérium entre le ^{150}Ce et le ^{160}Ce pour les calculs HFp, HF, HFBp et HFB.

depuis le ^{150}Ce jusqu'au ^{160}Ce pour les états HFp, HF, HFBp et HFB. Comme cela est montré dans l'annexe F, le potentiel chimique est bien défini dans la limite d'appariement nul. Il a donc un sens pour les états HF(p). Pour des raisons de visibilité graphique, les résultats sont présentés pour une sous-partie représentative de toute la ligne isotopique.

Comparant les résultats HF(B)p avec les résultats HF(B), nous constatons la prise en compte complète de l'évolution du potentiel chimique associée à l'ajout d'un nucléon dans l'état complètement apparié, tandis que la création de la qp ne le modifie plus. Ce résultat est valable quelle que soit l'intensité de l'appariement dans le système et prouve d'un point de vue non-perturbatif que le processus de création de qp se fait à nombre de particules constant comme le suggérait l'étude perturbative. En d'autres termes, cela confirme d'un point de vue quantitatif que l'addition du nucléon proprement dite est réalisée dans la structure de nombre parité pair et que le processus de création de qp dans l'état final en est découplé.

L'évolution du potentiel chimique avec la masse dépend du spectre à une particule sous-jacent et des nombres d'occupation. Les spectres de neutrons correspondants aux états HFB(p) sont donnés sur la Fig. 8.3. Pour les noyaux impairs, la dégénérescence de Kramers est levée dans l'état HFB, conduisant à une oscillation des énergies individuelles. Oubliant cet effet pour l'instant et considérant la moyenne arithmétique de chaque doublet, nous observons une superposition parfaite des spectres HFBp et HFB conformément aux calculs perturbatifs du splitting $\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_{\bar{k}}$ dans l'état HF(B). La même conclusion peut-être tirée de la Fig. 8.4 pour les spectres HF(p), montrant ainsi la validité de cette remarque dans la limite d'appariement nul.

Nous pouvons non seulement conclure que l'addition du nucléon est prise en compte dans l'état HF(B)p mais que l'évolution moyenne avec la masse de quantités fines telles que le spectre de particules indépendantes l'est aussi. Mise à part la brisure de l'invariance

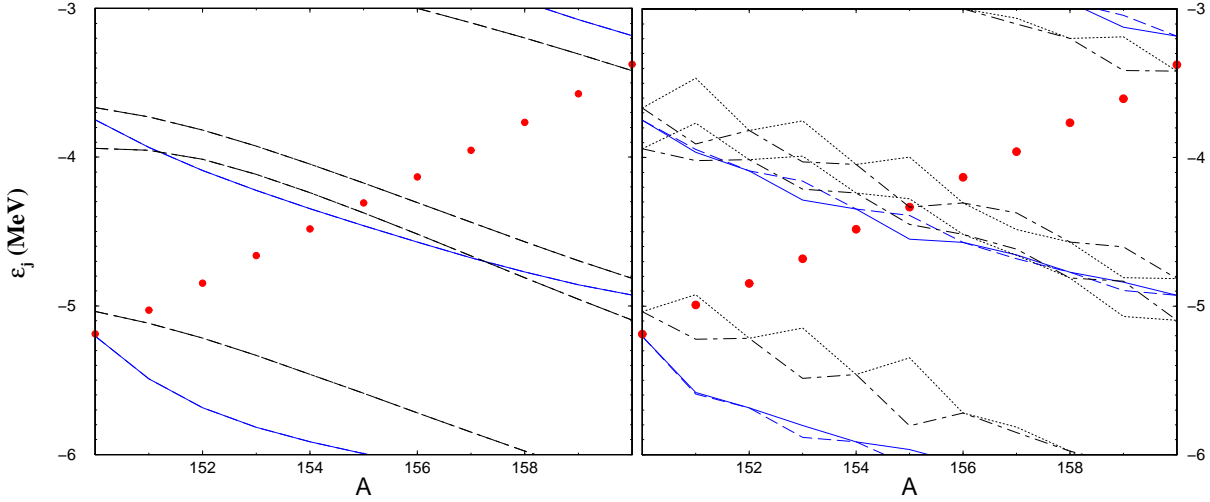


FIG. 8.3 – Spectre de neutrons (valeurs propres du hamiltonien HF h) en fonction de la masse entre le ^{150}Ce et le ^{160}Ce . La partie de gauche correspond au cas HFBp, et celle de droite au cas HFB. Les conventions pour (parité, signature) sont : $(+, +)$ = ligne pleine, $(+, -)$ = ligne en tirets, $(-, +)$ = ligne pointillée, $(-, -)$ = ligne en tirets-pointillés. Les points désignent le potentiel chimique.

par renversement du temps tout entière incluse dans le processus de création de qp, il est raisonnable de dire que les propriétés du champ moyen d'un noyau impair sont celles d'une structure paire sous-jacente.

Cela se confirme à travers l'étude d'autres observables. La Fig. 8.5 donne la dépendance en masse de la déformation quadrupolaire. L'évolution lisse associée à l'ajout d'un nucléon est prise en compte dans l'état HFBp. Dans l'état HFB impair, une petite modification supplémentaire de la déformation apparaît en raison de la création de la qp. Le schéma proposé permet de séparer ces contributions de natures différentes.

Même si les conclusions générales précédentes sont valides dans les deux cas, les résultats quantitatifs diffèrent selon que l'appariement est inclus ou non dans le traitement. Les parties de gauche des Fig. 8.3 et 8.4 montrent que les spectres à une particule associés aux états HFBp et HFp sont significativement différents. De plus, la Fig. 8.2 montre l'évolution plus régulière de $\lambda_{HFB(p)}$ comparée à celle de $\lambda_{HF(p)}$. Cela dénote le caractère non-perturbatif de l'effet des corrélations d'appariement et la façon dont elles modifient profondément la fonction d'onde.

La différence fondamentale entre $|\Phi^{HFBp}\rangle$ et $|\Phi^{HFp}\rangle$ est liée à la façon dont un nucléon est ajouté en présence ou en absence d'appariement dans le système : tandis qu'il est ajouté sur une paire d'orbitales bien spécifique dans le cas HFp, il est réparti sur plusieurs niveaux d'énergies autour de Fermi dans le cas HFBp du fait de la diffusion de paires. Cela se traduit par l'évolution plus irrégulière de $\lambda_{HF(p)}$ qui reflète directement le caractère discret du spectre de particules indépendantes (voir Fig. 8.4).

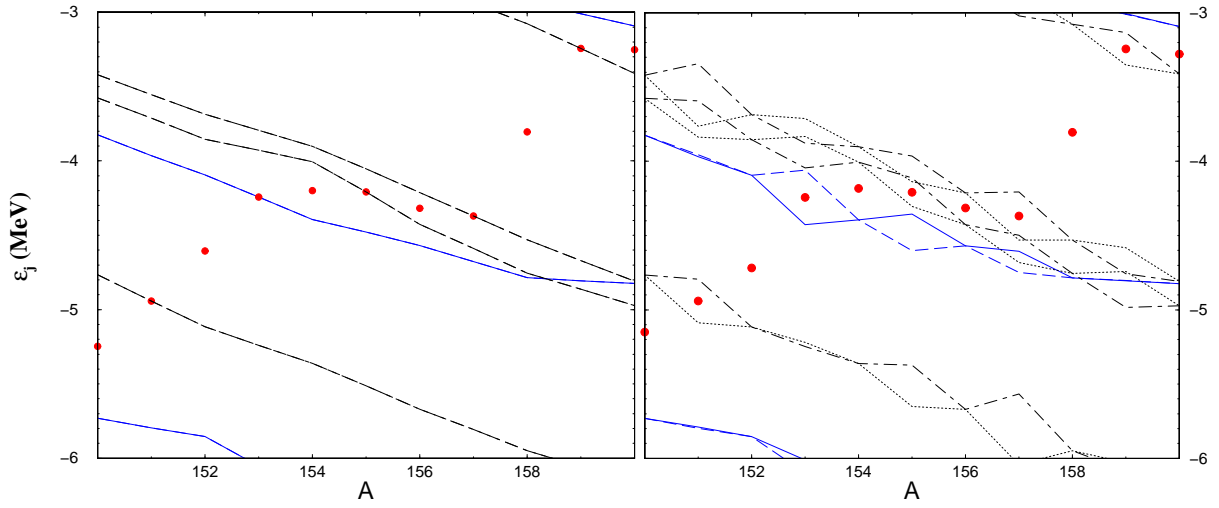


FIG. 8.4 – Mêmes courbes que sur la Fig. 8.3 dans les cas HFp et HF respectivement.

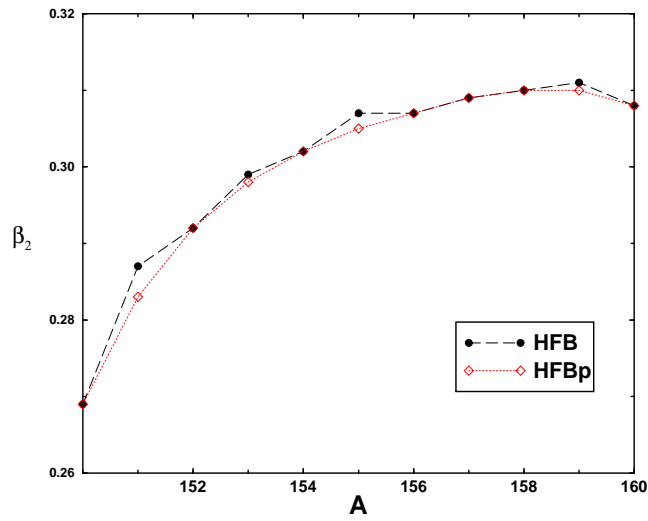


FIG. 8.5 – Paramètre de déformation quadrupolaire axiale $\beta_2 = \sqrt{\frac{\pi}{5}} \frac{\langle Q_{20} \rangle}{A \langle r^2 \rangle}$ des états HFB et HFBp entre le ^{150}Ce et le ^{160}Ce .

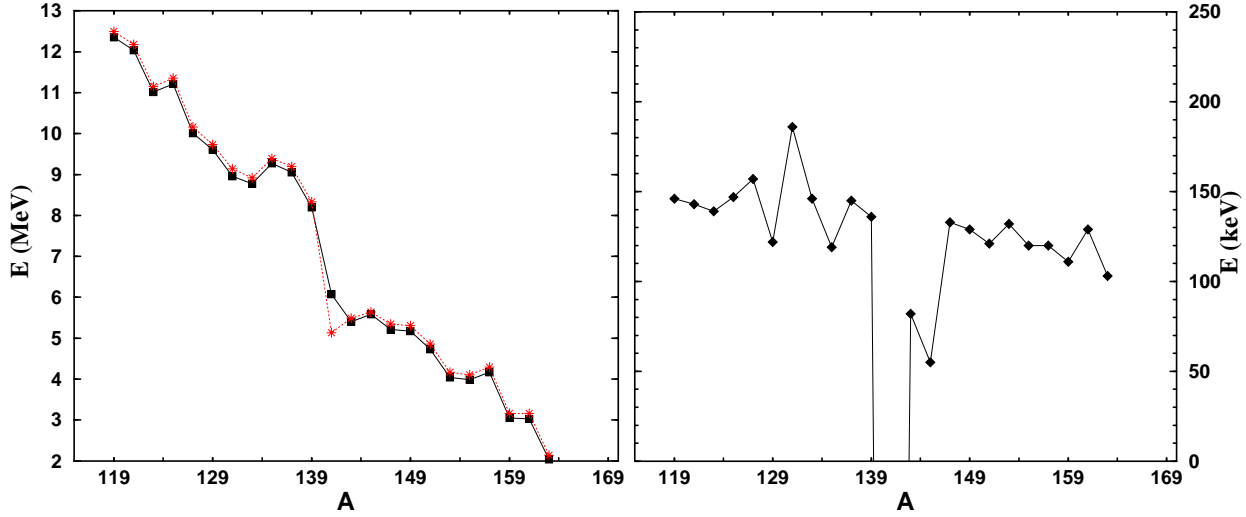


FIG. 8.6 – Comparaison entre la différence en énergie $\mathcal{E}^{HFp}(N) - \mathcal{E}^{HFp}(N + 1)$ (centrée sur $N + 1$ impair), obtenue par des calculs HFB auto-cohérents à la limite d'appariement nul (*Ligne pleine et carrés*) et la formule d'approximation à l'ordre deux en $\delta\bar{\rho}$ donnée par la formule 7.10 (*Ligne pointillée et étoiles*). Graphique de gauche : valeurs absolues (MeV). Graphique de droite : différence entre les deux (keV).

8.3 Ajout du nucléon.

8.3.1 Limite d'appariement nul.

La partie de gauche de la Fig. 8.6 donne la différence en énergie auto-cohérente $\mathcal{E}^{HFp}(N) - \mathcal{E}^{HFp}(N + 1)$, centrée sur $N + 1$ impair. Cette quantité donne l'énergie de séparation d'un nucléon sans prise en compte de la brisure de l'invariance par renversement du temps. Les effets importants de réarrangement liés à l'auto-cohérence et à la variation de déformation le long de la ligne isotopique sont notables et se traduisent par la non monotonie de l'énergie de séparation avec la masse. Malgré cela, on distingue nettement la couche magique $N = 82$ à travers la décrochement autour de $A = 140$.

Il est possible d'évaluer cette différence en injectant les éléments de matrice des champs HF déterminés de manière itérative dans l'Eq. 7.10 obtenue à l'ordre deux des perturbations ou dans l'Eq. 7.18 qui la simplifie à l'ordre un. Comparons ces résultats à la différence d'énergie totale obtenue par les calculs auto-cohérents.

La formule dérivée au premier ordre des perturbations est immédiatement invalidée par la violation systématique de l'Eq 7.17, les énergies individuelles étant significativement différentes dans les états $|\Phi^{HFp}(N)\rangle$ et $|\Phi^{HFp}(N + 1)\rangle$ comme le montre la partie gauche de la Fig. 8.4. La comparaison entre l'approximation à l'ordre deux et la différence en énergie $\mathcal{E}^{HFp}(N) - \mathcal{E}^{HFp}(N + 1)$ est donnée sur la partie gauche de la Fig. 8.6. Nous constatons un bon accord qualitatif, notamment dans les régions où l'auto-cohérence joue un rôle significatif.

La partie droite donne la différence entre ces deux quantités. On constate une sur-

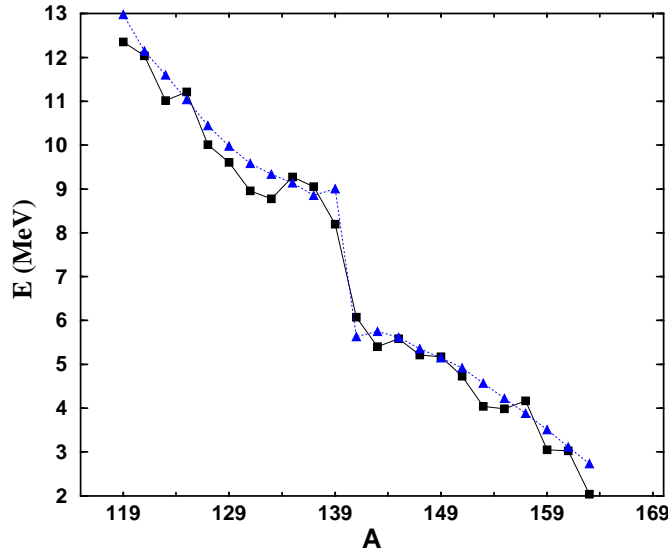


FIG. 8.7 – Comparaison entre la différence en énergie auto-cohérente $\mathcal{E}^{HFBp}(N) - \mathcal{E}^{HFBp}(N + 1)$ obtenue pour un appariement réaliste (*Ligne pointillée et triangles*) et dans la limite d'appariement nul (*Ligne pleine et carrés*) le long de la ligne isotopique de cérium.

évaluation systématique de l'énergie de séparation auto-cohérente par la formule d'approximation proposée. Celle-ci est relativement constante le long de la ligne isotopique et typiquement de l'ordre de 100-150 keV à l'exception du passage de la couche magique où la formule d'approximation n'est déjà pas satisfaisante du point de vue qualitatif. Ce désaccord montre les limites de l'hypothèse consistant à négliger le réarrangement des fonctions d'ondes individuelles lors de l'ajout du nucléon dans la fonction d'onde de nombre parité pair. Les noyaux de cériums sont particulièrement indiqués pour mettre en relief cette limite du fait de la forte variation de leur déformation tout le long de la ligne isotopique comme le montre la Fig. 8.1. On pouvait s'attendre à ce que la polarisation radiale et angulaire des orbites par le nucléon supplémentaire influe notablement sur l'énergie de séparation (la *Kontraktionskorrektur* de Koopmans [70]). Le caractère régulier de la variation de la déformation avec la masse explique quant à lui la relative constance du désaccord entre la formule perturbative et la différence des énergies totales auto-cohérentes. Il serait intéressant de tester cette formule d'approximation le long d'une ligne isotopique de noyaux semi-magiques où le réarrangement angulaire des orbites est en général négligeable et où seul le réarrangement radial joue un rôle. Les étains pour lesquels nous présenterons des résultats n'ont pas été calculés dans la limite d'appariement nul ce qui interdit cette comparaison.

8.3.2 Prise en compte de l'appariement.

Dans le cas où l'appariement dans le système est pris en compte, la différence en énergie à considérer est $\mathcal{E}^{HFBp}(N) - \mathcal{E}^{HFBp}(N + 1)$. Celle-ci traduit l'extraction d'un nucléon d'un état totalement apparié vers un autre état totalement apparié (nombre parité pair). La

Fig. 8.7 compare cette quantité aux résultats du calcul sans appariement. Cette énergie de séparation est plus lisse en présence d'appariement puisqu'elle reflète moins le caractère discret du spectre dans ce cas, le nucléon étant ajouté (ou extrait) sur (de) l'ensemble de la mer de Fermi. De plus, l'appariement donne en général une surstabilité au système vis à vis de l'extraction du nucléon. Celle-ci varie schématiquement entre 0 et 1 MeV. Bien évidemment, cette conclusion ne prend pas en compte l'effet anti-liant associé au non-appariement du nucléon célibataire et au blocage de l'appariement qui en découle dans le vrai état impair. Ces derniers effets seront mis en exergue par l'étude de la seconde étape du processus d'ajout du nucléon.

Du fait de l'impossibilité de dériver une formule d'approximation pour l'énergie associée à l'ajout d'un nucléon dans la structure paire en présence d'appariement (voir section 7.3.1), aucun test de la sorte n'est donc fait dans la présente section.

8.4 Création de la quasi-particule.

Nous rappelons que la création de la qp sur le vide de nombre parité pair incarne la spécification de l'orbite occupée par le nucléon impair célibataire. Nous commençons par en étudier les implications énergétiques dans la limite d'appariement nul. Ce processus isole dans ce cas l'effet de la seule brisure de l'invariance par renversement du temps dans le noyau impair.

8.4.1 Limite d'appariement nul.

La brisure de symétrie a pour premier effet de lever la dégénérescence de Kramers entre les états individuels renversés du temps (voir Fig. 8.3 et 8.4). Comme cela a été montré [150, 151], cet effet est le plus important pour les états partenaires (n, \bar{n}) correspondant à la qp créée. Cela peut se comprendre qualitativement au moyen de l'Eq. 7.13 évaluant cette levée de dégénérescence à l'ordre deux des perturbations. Pour $k \neq n$, le premier élément de matrice \bar{v}_{knkn} annule partiellement le second et diminue ainsi le splitting entre les deux états partenaires.

Du point de vue de l'énergie totale, la différence $E^{pol} = \mathcal{E}^{HF}(N+1) - \mathcal{E}^{HFp}(N+1)$ donne une mesure quantitative de l'effet de la création de qp et donc de la brisure de l'invariance par renversement du temps. La Fig. 8.8 montre que l'effet net est anti-liant, l'ordre de grandeur typique de celui-ci étant la centaine de keV. Le long de la ligne isotopique des noyaux de cérium, il varie de 48 keV pour le ^{155}Ce à 223 keV pour le ^{147}Ce .

Avec la même force de Skyrme, l'effet des termes impairs de la fonctionnelle sous renversement du temps a été trouvé attractif pour certains noyaux légers [152]. La contradiction apparante entre ces résultats et ceux obtenus par nous pourrait être due à la dépendance en masse de l'effet de la brisure de l'invariance par renversement du temps ou à la compétition entre les contributions isoscalaires et isovectorielles [153]. En effet, la contribution des termes isovectoriels est très faible dans les noyaux légers $N \approx Z$ étudiés dans la Ref. [152], à l'inverse de ce qui se produit pour isotopes de cérium étudiés ici.

Comparons à présent ces résultats à ceux obtenus à partir de la formule d'approximation 7.15 lorsque l'on y injecte les énergies de particules indépendantes extraites des calculs

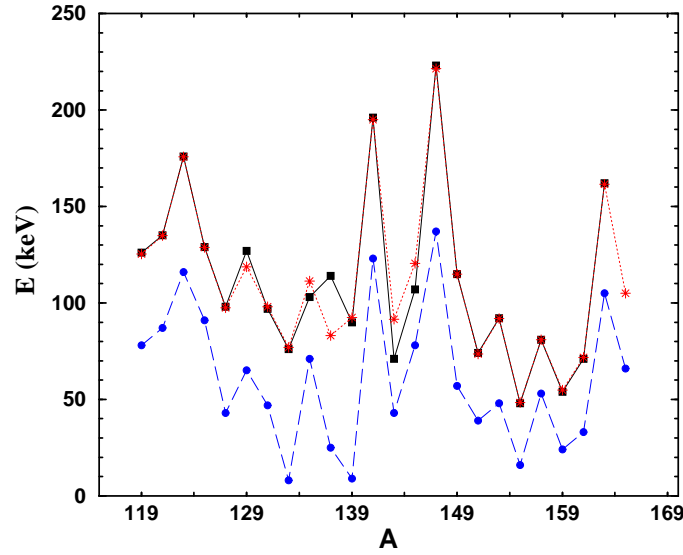


FIG. 8.8 – Comparaison entre la différence en énergie auto-cohérente $E^{pol} = \mathcal{E}^{HF}(N + 1) - \mathcal{E}^{HFp}(N + 1)$ (ligne pleine et carrés) le long de la chaîne isotopique des noyaux de cérium et la formule d'approximation au second ordre en $\delta\bar{\rho}$ (ligne pointillée et étoiles). La contribution des termes impairs sous renversement du temps à la différence en énergie auto-cohérente est également tracée (ligne tiretée et ronds).

auto-cohérents. Cette prescription dont les résultats sont également portés sur la Fig. 8.8 reproduit de manière excellent l'énergie de qp auto-cohérente tout le long de la ligne isotopique. La présente comparaison justifie la négligeabilité supposée du réarrangement des fonctions d'onde individuelles lors de la création d'une qp et montre que l'ordre deux des perturbations suffit à déterminer la structure de la formule d'approximation. L'aspect non-linéaire du problème est quant à lui pris en compte par la détermination itératives des énergies de particules indépendantes. Finalement, la qualité de l'accord permet de proposer la formule 7.15 comme une approximation fiable de l'effet de brisure de l'invariance par renversement dans l'état impair. Ce résultat est particulièrement intéressant du fait que la formule perturbative ne requiert que le calcul de l'état $|\Phi_n^{HF}(N + 1)\rangle$.

Sur la Fig. 8.8 est également tracée la contribution à la différence en énergie $\mathcal{E}^{HF}(N + 1) - \mathcal{E}^{HFp}(N + 1)$ des termes de la fonctionnelle impairs sous renversement du temps. Celle-ci représente en moyenne les 2/3 de l'effet total. De plus, cette figure montre que le comportement irrégulier de E^{pol} avec la masse est directement lié à cette contribution, tandis que la contribution des termes pairs reflète beaucoup moins la nature des orbites bloquées.

Le fait que l'effet de la brisure de l'invariance par renversement du temps sur l'énergie ne soit relié qu'aux propriétés d'une paire d'orbites, comme illustré par l'Eq. 7.15, a aussi été mis en relief dans la Ref. [152] où l'identité :

$$E^{pol}(N - Z = 2n) = E^{pol}(N - Z = 2n + 1) + E^{pol}(N - Z = 2n - 1) \quad , \quad (8.2)$$

a été caractérisée. Plus précisément, il est possible de relier l'amplitude de cet effet à trois

caractéristiques de la qp créée dans le fondamental impair.

Dans un ordre décroissant d'importance, nous avons : une faible valeur de la projection m_z du moment angulaire sur l'axe de deformation (nombre quantique K pour l'état à N corps correspondant), une énergie individuelle ϵ_n très "plongeante" avec la masse, et une valeur élevée du moment angulaire j pour la couche sphérique dont l'orbite est issue. Un noyau impair caractérisé par une telle qp inclura un effet important de brisure de symétrie sur l'énergie. Cela n'est pas surprenant puisque ces caractéristiques sont typiques des états intrus connus pour jouer un rôle important dans les propriétés de rotation qui mettent également en jeu les termes impairs de la fonctionnelle.

Ainsi, la valeur importante de E^{pol} pour le ^{147}Ce est associée à la création de la qp intrusive provenant de la couche $1i13/2$ définie par les nombres quantiques de Nilsson $[660]1/2$. Dans le ^{123}Ce et dans le ^{141}Ce , l'importance de l'effet correspond au blocage de l'orbite $[541]1/2$ provenant de la couche sphérique $2f7/2$. Ces deux derniers noyaux sont particulièrement intéressants puisque en dépit de leurs masses et leurs déformations différentes (voir Fig. 8.5), ils présentent une valeur de E^{pol} très similaire s'expliquant simplement par le fait que la même qp est bloquée dans les deux cas. Ce résultat montre que le nombre quantique m_z joue un rôle central dans l'importance de la brisure de l'invariance par renversement du temps.

8.4.2 Prise en compte de l'appariement.

Lorsque les corrélations d'appariement sont incluses dans le traitement, la différence en énergie $E^{pol} + \Delta = \mathcal{E}^{HFB}(N+1) - \mathcal{E}^{HFBp}(N+1)$ associée à la création de qp mélange les effets dus à la brisure de l'invariance par renversement du temps et les effets anti-liants issus du non-appariement du nucléon célibataire et du blocage de l'appariement qui en découle. Comparer cette différence avec celle obtenue dans la limite d'appariement nul n'aurait donc pas beaucoup de sens. En revanche, le calcul en perturbation mené dans la section 7.3.2 a permis de montrer que la contribution de la brisure de l'invariance par renversement du temps s'exprime de façon identique quelle que soit l'intensité de l'appariement. Ainsi, nous pouvons comparer cet effet dans les deux cas limites en utilisant les énergies individuelles tirées de chacun des calculs auto-cohérents.

Cette comparaison est réalisée sur la Fig 8.9. Logiquement, E^{pol} reste du même ordre de grandeur lorsque l'appariement est enclenché, même s'il peut différer significativement pour un noyau donné. Dans le cas de l'appariement non-nul, quelques valeurs manquent en raison de problèmes de convergence rencontrés pour certains noyaux lors du calcul de l'état impair bloqué² ou lorsque les bases canoniques des états $|\Phi^{HFBp}(N+1)\rangle$ et $|\Phi_n^{HFB}(N+1)\rangle$ diffèrent trop. Nous reviendrons sur ce point.

Selon les caractéristiques de la force et en raison de l'auto-cohérence des calculs, l'ordre des qps dans le vide de nombre parité pair $|\Phi^{HFBp}(N+1)\rangle$ peut être modifié lorsque l'intensité de l'appariement croît. Les nombres quantiques des qps correspondant aux fondamentaux des noyaux de cérium impairs sont donnés dans le tableau 8.1. Étant donné le lien direct entre la qp créée et l'effet de brisure de symétrie sur l'énergie, ce réarrangement des qps est une des raisons pour lesquelles l'effet diffère pour certains

²Étant donnée la finesse des effets que nous étudions ici, nous parlons de "problèmes de convergence" lorsque celle-ci n'a pas été obtenue au keV près.

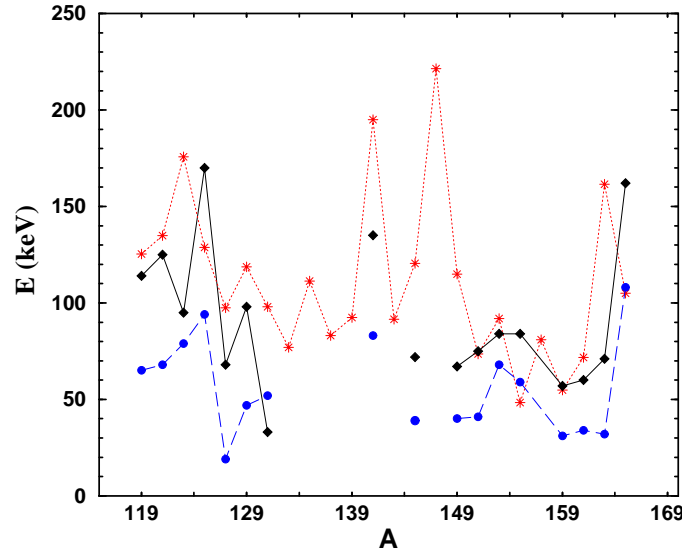


FIG. 8.9 – Comparaison des formules d'approximation évaluant l'effet de brisure de l'invariance par renversement du temps dans le cas de l'appariement réaliste (*ligne pleine et losanges*) et dans la limite d'appariement nul (*ligne pointillée et étoiles*). La contribution des seuls termes impairs sous renversement du temps est également tracée (*ligne tiretée et ronds*).

noyaux selon que l'appariement est ou non pris en compte. Tel est le cas par exemple des noyaux de $^{123,145,147,155,163,165}\text{Ce}$. Par exemple, le tableau 8.1 montre un décalage de deux unités de masse pour les qps créées dans les noyaux de $^{161,163,165}\text{Ce}$ lorsque l'appariement est enclenché. Ce décalage se traduit par une translation des résultats visible sur la Fig 8.9.

Il y a seulement huit noyaux pour lesquels la qp créée est la même dans les deux limites. Pour quatre d'entre eux ($^{119,129,151,159}\text{Ce}$) l'effet de la brisure sur l'énergie n'est pas significativement modifié par l'enclenchement de l'appariement. Cependant, pour trois autres ($^{125,131,141}\text{Ce}$) l'auto-cohérence entre le canal p-t et le canal p-p est suffisante pour induire une modification substantielle du splitting $\tilde{\epsilon}_n - \tilde{\epsilon}_{\bar{n}}$.

Entre le ^{141}Ce et le ^{163}Ce l'effet de brisure présente un comportement plus lisse dans le cas où l'appariement est inclu que dans le cas où il ne l'est pas. En effet, tandis que la qp la plus basse change nécessairement d'un impair à l'impair suivant dans la limite d'appariement nul, la même qp peut rester la plus basse en énergie pour plusieurs noyaux consécutifs lorsque l'appariement est enclenché. Lorsque cela se produit, E^{pol} est pratiquement constant sur plusieurs unités de masse.

La prise en compte de l'appariement ne change pas la proportion de la contribution des termes impairs à E^{pol} comme le montre la Fig. 8.9. Ajoutons que la sensibilité des composantes impaires de la fonctionnelle aux nombres quantiques (m_z, j) de la qp créée est de nouveau illustrée.

L'effet de la brisure de l'invariance par renversement du temps a été calculé pour la ligne isotopique des étains dans le cadre du champ moyen relativiste [154]. Les corrélations

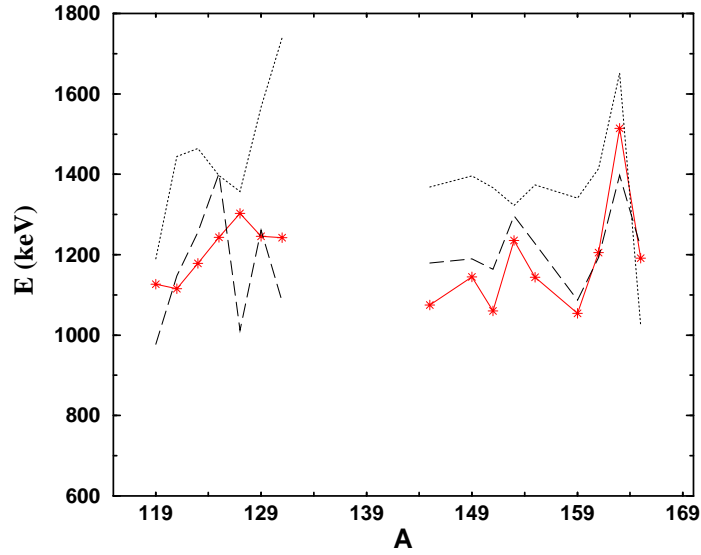


FIG. 8.10 – Comparaison entre l'énergie de qp auto-cohérente [$\mathcal{E}^{HFB}(N+1) - \mathcal{E}^{HFBp}(N+1)$] (*ligne pleine et étoiles*), la formule d'approximation à l'ordre un des perturbations [$\bar{\Delta}_n$] (*ligne pointillée*) et la formule d'approximation à l'ordre 2 des perturbations [$\tilde{\Delta}_n + 3(\bar{\epsilon}_n - \bar{\epsilon}_{\bar{n}})/4$] (*ligne tiretée*).

d'appariement étaient traitées à l'approximation BCS. L'effet a été trouvé liant de l'ordre de 300 keV pour deux paramétrisations de la force. De notre côté, nous avons mené la même étude dans le cadre des calculs HFB non-relativistes et trouvé un effet déliant de l'ordre de 100 keV avec la force SLy4. Ce désaccord quant au caractère liant ou anti-liant de l'effet dans un même noyau illustre l'incertitude existante quant à l'ajustement des termes impairs de la fonctionnelle de Skyrme du fait de leur contrainte indirecte par les termes pairs [31]. Un point important du présent travail est d'avoir pu relier l'effet de la brisure de l'invariance par renversement du temps à un élément de matrice spécifique $\bar{V}_{n\bar{n}n\bar{n}}$ de la force dans le canal p-t. Celui-ci peut-être déterminé par le calcul du seul état invariant par renversement du temps $|\Phi^{HFBp}(N+1)\rangle$. Ce résultat autorise a priori une contrainte simple et directe des termes de la fonctionnelle impairs sous renversement du temps majoritairement responsables de cette brisure comme nous venons de le montrer. Un moyen simple de contraindre ces termes est aujourd'hui nécessaire comme cela a été rappelé dans la partie introductive. Le problème est d'isoler cet effet dans les données expérimentales. Notamment, toute comparaison entre les énergies de séparation théoriques et expérimentales nécessite la prise en compte d'effets au-delà du champ moyen tels que le couplage particule/vibration [38].

Après avoir discuté de l'influence de l'appariement sur le seul effet de brisure de l'invariance par renversement du temps, nous allons traiter du non-appariement du nucléon célibataire et du blocage de l'appariement qui lui est associé. La somme de ces effets constitue l'énergie de qp dont la version auto-cohérente $\mathcal{E}^{HFB}(N+1) - \mathcal{E}^{HFBp}(N+1) = [E^{pol} + \Delta](N+1)$ est donnée sur la Fig. 8.10.

Cette figure met tout d'abord en relief l'ordre de grandeur différent des deux contribu-

tions à l'énergie de qp. Tandis que l'effet de la brisure de l'invariance par renversement du temps est de l'ordre de 100-200 keV comme indiqué par la Fig. 8.9, $\Delta(N)$ porte l'énergie de qp aux alentours de 1.1-1.3 MeV. Nous constatons également une variation moyenne de l'énergie de qp de 10% entre deux impairs consécutifs, avec un maximum de 25% entre le ^{163}Ce et ses voisins.

La Fig. 8.10 propose également une comparaison entre l'énergie de qp auto-cohérente et les formules d'approximation à l'ordre un (Eq. 7.35) et à l'ordre deux des perturbations (Eq. 7.32, seconde égalité³) usant des éléments de matrice des champs déterminés de manière itérative. La formule à l'ordre un surestime systématiquement l'énergie de qp d'environ 200 keV en moyenne. Cela est dû au fait que le blocage de l'appariement n'est pas pris en compte à cet ordre. À l'ordre deux, la formule d'approximation fournit une meilleure approximation de $E^{pol} + \Delta$ grâce à la prise en compte combinée du blocage de l'appariement et de la brisure de l'invariance par renversement du temps induits par le nucléon célibataire. L'accord qualitatif est satisfaisant, notamment dans la région $^{149-165}\text{Ce}$. Ce résultat montre que la structure de la formule perturbative obtenue à l'ordre deux des perturbations contient l'essentiel de la physique impliquée dans la création d'une qp et que la non-linéarité du problème est uniquement important pour déterminer la valeur quantitative des champs. En revanche, l'accord quantitatif n'est pas suffisant pour pouvoir travailler à une précision de l'ordre de E^{pol} . Plusieurs raisons existent à cela. Premièrement, la dérivation perturbative a été faite en supposant l'utilisation d'une même force dans les canaux p-t et p-p; hypothèse qui n'est pas vérifiée dans les calculs auto-cohérents dont nous présentons les résultats. D'autre part, et c'est là le point le plus important, l'hypothèse faite pour dériver les formules d'approximation supposant l'équivalence des bases canoniques de l'état de nombre parité pair $|\Phi^{HFBp}(N+1)\rangle$ et de l'état de nombre parité impair $|\Phi_n^{HFB}(N+1)\rangle$ n'est jamais vérifiée en pratique. Dans un grand nombre de cas, nous avons pu constater que la qp créée dans le fondamental impair implique plusieurs couples d'états (l, \bar{l}) de la base canonique de l'état $|\Phi^{HFBp}(N+1)\rangle$, de telle sorte que les formules d'approximation 7.29 ou 7.32 ne sont pas applicables. Ainsi, les cas manquants sur les Fig. 8.9 et 8.10 le sont principalement en raison de l'impossibilité de choisir un couple (n, \bar{n}) pour appliquer la formule 7.32. Les noyaux pour lesquels un résultat apparaît sont tels qu'une paire (n, \bar{n}) domine dans la qp créée. Dans ces cas, une corrélation nette existe entre la qualité du calcul perturbatif et la façon dont l'orbite en question domine dans le vecteur (U, V) associé à la qp créée.

Nous allons maintenant utiliser le schéma développé et les résultats obtenus jusqu'ici pour étudier l'oscillation des masses pair-impair dans les noyaux et caractériser les différentes contributions aux formules de différences de masses afin d'isoler le "gap d'appariement" [155, 156].

³La formule relative à la première égalité de l'Eq. 7.32 ainsi que celle associée à l'Eq. 7.29 donnent des résultats équivalents.

TAB. 8.1 – Nombres de Nilsson des qps créées pour décrire le fondamental des isotopes de cérium impairs pour une intensité nulle de la force d'appariement d'une part et réaliste d'autre part (en MeV.fm⁻³). Ces nombres ne sont pas reportés lorsque la qp crée mélange plusieurs états de Nilsson.

Cérium	$V_n^{p-p} = 0$	$V_n^{p-p} = 1250$
	K[Nn _z Λ]	
¹¹⁹ Ce	3/2[422]	3/2[422]
¹²¹ Ce	3/2[422]	5/2[532]
¹²³ Ce	1/2[541]	5/2[413]
¹²⁵ Ce	1/2[411]	1/2[411]
¹²⁷ Ce	7/2[523]	5/2[402]
¹²⁹ Ce	7/2[523]	7/2[523]
¹³¹ Ce	7/2[404]	7/2[404]
¹³³ Ce	9/2[514]	
¹³⁵ Ce	3/2[402]	
¹³⁷ Ce	9/2[514]	
¹³⁹ Ce	11/2[505]	
¹⁴¹ Ce	1/2[541]	1/2[541]
¹⁴³ Ce	3/2[532]	3/2[532]
¹⁴⁵ Ce	1/2[530]	3/2[532]
¹⁴⁷ Ce	1/2[660]	
¹⁴⁹ Ce	3/2[651]	3/2[521]
¹⁵¹ Ce	3/2[521]	3/2[521]
¹⁵³ Ce	5/2[642]	3/2[521]
¹⁵⁵ Ce	5/2[523]	1/2[521]
¹⁵⁷ Ce	1/2[521]	
¹⁵⁹ Ce	5/2[512]	5/2[512]
¹⁶¹ Ce	7/2[633]	5/2[512]
¹⁶³ Ce	1/2[600]	7/2[633]
¹⁶⁵ Ce	1/2[510]	1/2[600]

Chapitre 9

Oscillation des masses pair-impair [143].

L'oscillation des masses pair-impair est un phénomène commun à plusieurs systèmes finis de fermions. Dans le noyau, elle est interprétée comme une preuve expérimentale de l'existence des corrélations d'appariement [157]. En disant que l'énergie de liaison des noyaux est une fonction douce du nombre de neutrons ou de protons à l'exception des effets d'appariement, des expressions simples de différence de masses pair-impair ont été dérivées dans le but d'approximer le gap d'appariement [1, 158]. Des études détaillées de l'appariement [155] ainsi que des ajustements de force [156] en ont souvent fait l'usage. La plus simple d'entre elles est la formule à trois points s'apparentant à une dérivée seconde discrète :

$$\Delta^{(3)}(N) = \frac{(-1)^N}{2} [E(N+1) - 2E(N) + E(N-1)] , \quad (9.1)$$

où N est le nombre de neutrons ou de protons.

Une étude de l'oscillation des masses pair-impair dans les clusters légers de métaux alcalins et dans les noyaux légers $N = Z$ [159] a abouti à la conclusion que ce phénomène n'était pas tant du aux corrélations d'appariement qu'aux effets de déformation (oscillation de Jahn-Teller) [160, 161]. Ce travail a été suivi d'une étude sur la contribution du champ moyen et de sa déformation à l'oscillation des masses dans les noyaux [162]. Afin d'isoler les effets du champ moyen, cette étude reposait sur des calculs HF dans les noyaux déformés légers. Dans ce contexte, une oscillation des masses a été mise en relief à travers l'obtention d'un $\Delta^{(3)}$ non nul, lui-même oscillant :

$$\begin{aligned} \Delta_{HF}^{(3)}(N) &\approx 0 && \text{pour } N \text{ impair ,} \\ &\approx \frac{\epsilon_n - \epsilon_{n-1}}{2} && \text{pour } N \text{ pair ,} \end{aligned} \quad (9.2)$$

où $\epsilon_n - \epsilon_{n-1}$ est le gap autour du niveau de Fermi dans le spectre individuel du noyau pair. On note qu'il est nul pour les noyaux sphériques (à l'exception du franchissement

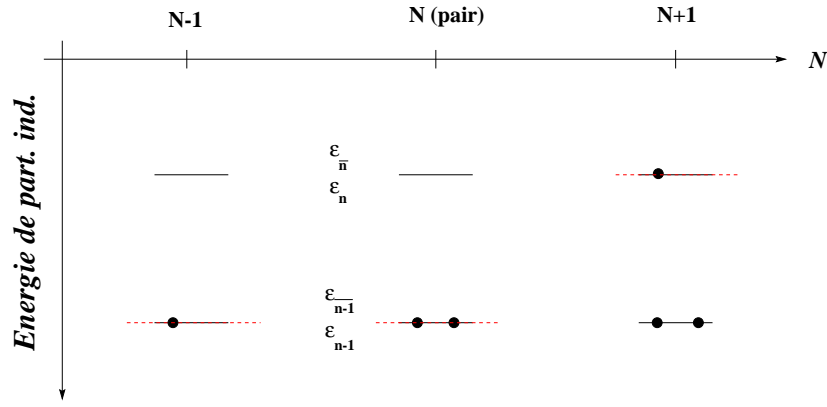


FIG. 9.1 – Représentation schématique du spectre de particules indépendantes et des occupations associées pour trois noyaux déformés successifs. Les lignes tiretées indiquent la position du niveau de Fermi.

d'une sous-couche) et non-nul pour les noyaux déformés en raison de l'étalement du spectre doublement dégénéré (voir Fig. 9.1). Ainsi, la déformation contribue à $\Delta_{HF}^{(3)}(pair)$ à travers son influence sur le spectre de particules indépendantes. La conclusion de l'étude menée dans la Ref. [162] est que $\Delta^{(3)}(impair)$ doit être une mesure des effets de l'appariement sur l'oscillation des masses lorsque ces corrélations sont prises en compte, tandis que $\Delta^{(3)}(pair)$ y ajoute l'éventuelle contribution de la déformation. Cette analyse présente l'avantage de fournir une explication au comportement oscillant des $\Delta^{(3)}$ expérimentaux pour les noyaux déformés [162], cette oscillation ne pouvant être due au gap d'appariement dont on n'attend pas de variation aussi brutale d'un noyau au noyau voisin. Cependant, un tel raisonnement ne peut expliquer l'observation de la même oscillation du $\Delta^{(3)}$ dans les noyaux sphériques. S'ajoutant à cette analyse, des calculs auto-cohérents incluant l'appariement (calculs HF+BCS) portant sur les isotopes sphériques d'étain ont abouti à la conclusion que la formule à cinq points $\Delta^{(5)}$ était une meilleure approximation du gap d'appariement que $\Delta^{(3)}(impair)$ [113].

Étant donnée cette situation confuse et controversée, nous proposons une étude des différentes contributions aux formules de masses dans le cadre de calculs auto-cohérents en y incluant au passage l'effet de la brisure de la symétrie par renversement du temps dans les noyaux impairs. Notre but premier est de donner une explication cohérente de l'oscillation des masses quelle que soit l'intensité de l'appariement dans le système et la déformation de celui-ci. Cela sera fait dans cette section à travers l'utilisation d'un modèle schématisé. Notre second but est de proposer une quantité directement liée au gap d'appariement. Cela sera fait dans la partie suivante grâce à des calculs quantitatifs. La description de l'oscillation des masses reposant sur une bonne compréhension de la structure des noyaux impairs vis à vis des noyaux pairs, le schéma développé et validé dans les sections précédentes est un outil particulièrement adapté à cette étude.

9.1 Formules de différence de masses.

La décomposition 8.1 sépare l'énergie de liaison d'un noyau en sa partie paire $HF(B)p$ et, s'il s'agit d'un noyau impair, en une partie reliée à la création de qp. La formule de différence de masses à n points s'écrira sous la forme [143] :

$$\Delta_{HFB}^{(n)}(N) = \Delta_{HFBp}^{(n)}(N) + \Delta_{app+pol}^{(n)}(N) , \quad (9.3)$$

où $\Delta_{HFBp}^{(n)}(N)$ est proportionnelle à la dérivée $n - 1^{ieme}$ de \mathcal{E}^{HFBp} par rapport à N et où $\Delta_{app+pol}^{(n)}(N)$ est une moyenne pondérée de $\Delta + E^{pol}$ sur $n - 1$ ou $n - 2$ noyaux impairs selon que N est impair ou pair. On aura par exemple :

$$\Delta_{HFBp}^{(3)}(N) = \frac{(-1)^N}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}^{HFBp}}{\partial N^2} \quad (9.4)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{app+pol}^{(3)}(N) &= \frac{1}{2} \{ [\Delta + E^{pol}] (N-1) + [\Delta + E^{pol}] (N+1) \} \quad \text{pour } N \text{ pair,} \\ &= [\Delta + E^{pol}] (N) \quad \text{pour } N \text{ impair.} \end{aligned} \quad (9.5)$$

Notons que $\Delta_{app+pol}^{(n)}(N)$ sera une quantité signifiante pour le noyau N si $\Delta + E^{pol}$ varie peu sur $n - 1$ ou $n - 2$ unités de masse. Nous avons vu sur l'exemple des noyaux de cérium comment cette quantité pouvait varier d'environ 10% entre deux impairs consécutifs. Ainsi, tandis que $\Delta_{app+pol}^{(3)}(impair)$ est égale à l'énergie de qp du noyau correspondant, $\Delta_{app+pol}^{(3)}(pair)$ ou $\Delta_{app+pol}^{(5)}(N)$ approximeront $\Delta + E^{pol}$ à environ 10% près.

Notons enfin que, $\Delta(N)$ et $E^{pol}(N)$ étant issus du même processus physique et étant particuliers aux noyaux impairs, aucune différence de masse ne pourra séparer leur contribution.

9.2 Présentation du modèle schématique.

Afin de dégager les éléments essentiels à une interprétation correcte de l'oscillation des masses, nous présentons une analyse fondée sur un modèle BCS schématique. Ce modèle ne repose sur aucune force à deux corps particulière puisque le spectre de particules indépendantes $\{\epsilon_k\}$ et les gaps d'appariement $\{\Delta_k\}$ sont donnés a priori. Ainsi, le gap est pris tel que :

$$\Delta_k = \Delta e^{-\left(\frac{\epsilon_k - \lambda}{3\Delta}\right)^2} , \quad (9.6)$$

où le gap Δ au niveau de Fermi est un paramètre ajustable, tandis que le spectre peut être donné arbitrairement ou provenir d'un calcul auto-cohérent d'un noyau pair-pair typique de la zone étudiée. Utiliser une autre fonction pour décrire le gap en fonction de

ϵ_k ne changerait pas les conclusions de l'étude à venir qui dépendent essentiellement de la valeur du gap au voisinage du niveau de Fermi¹. Afin de faire la différence avec les calculs auto-cohérents, les notations HFB(p) sont changées en BCS(p) dans cette section. Dans la limite d'appariement nul, nous utilisons toujours la notation HF(p).

Dans ce contexte, la partie totalement appariée de l'énergie est celle du vide BCS de nombre parité pair :

$$\mathcal{E}^{BCSp}(N) = \sum_k v_k^2 \epsilon_k - \frac{1}{2} \sum_{k>0} \frac{\Delta_k^2}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda^N)^2 + \Delta_k^2}} , \quad (9.7)$$

où λ^N est fixé par la condition $\langle N \rangle = N$ (pair ou impair). Pour N pair, cette énergie est celle de l'état fondamental. Pour N impair, l'énergie BCS de l'état fondamental est au premier ordre des perturbations :

$$\mathcal{E}^{BCS}(N) = \mathcal{E}^{BCSp}(N) + \text{Min} \{E_k^N\} , \quad (9.8)$$

où les $E_k^N = \sqrt{(\epsilon_k - \lambda^N)^2 + \Delta_k^2}$ sont les énergies de qps évaluées dans l'état de nombre parité pair ayant un nombre impair de nucléons. Une fois ces énergies obtenues, les différences de masses $\Delta_{BCS}^{(3)}$, $\Delta_{BCSp}^{(3)}$, $\Delta_{BCS}^{(5)}$ et $\Delta_{BCSp}^{(5)}$ peuvent être calculées.

9.3 Isotopes de cérium.

Deux applications du modèle schématique ont été réalisées pour les isotopes de cérium. Nous avons tout d'abord utilisé un spectre équidistant, doublement dégénéré, présentant un écart $\delta\epsilon = 400$ keV typique d'un isotope de cérium déformé autour du ^{152}Ce . Dans un second temps, nous utilisons le spectre issu du calcul HF du ^{152}Ce (cf. Fig 8.4). Les calculs sont effectués pour six valeurs de Δ , depuis zéro jusqu'à une valeur réaliste de 1200 keV déduite du calcul HFB du ^{152}Ce . La Fig. 9.2 donne l'évolution de $\Delta_{BCS}^{(3)}$, $\Delta_{BCS}^{(5)}$ avec le gap entre le ^{148}Ce et le ^{156}Ce pour ces deux choix de spectre.

Pour $\Delta = 0$, nous retrouvons qualitativement les résultats obtenus dans la Ref. [162] à l'approximation HF sans brisure de l'invariance par renversement du temps (cf. Eq. 9.2). En effet, une oscillation de $\Delta_{BCS}^{(3)}$ entre 0 pour N impair et une valeur non nulle pour N pair est observée, tandis que $\Delta_{BCS}^{(5)}$ est non nul pour tout N . Il s'en suit que $\Delta_{BCS}^{(3)}(\text{impair})$ extrait le gap (nul) dans ce cas.

Lorsque Δ augmente, tel n'est plus le cas. Les formules de différence de masses sont translatées vers le haut de telle sorte que $\Delta_{BCS}^{(5)}$ tend à extraire le gap tandis que $\Delta_{BCS}^{(3)}$ oscille autour de cette valeur. Avec le spectre équidistant, cette situation asymptotique est atteinte lorsque Δ est égal à 200 keV ; i.e c'est à dire pour un rapport $\Delta/\delta\epsilon \approx 0.5$. Notons qu'à l'exception des noyaux magiques, le rapport $\Delta/\delta\epsilon$ est typiquement supérieur à 0.5 dans les noyaux.

¹La "fonction" $\Delta(\epsilon_k)$ obtenue avec la force de Gogny par exemple prend plutôt l'allure d'une fonction de Fermi.

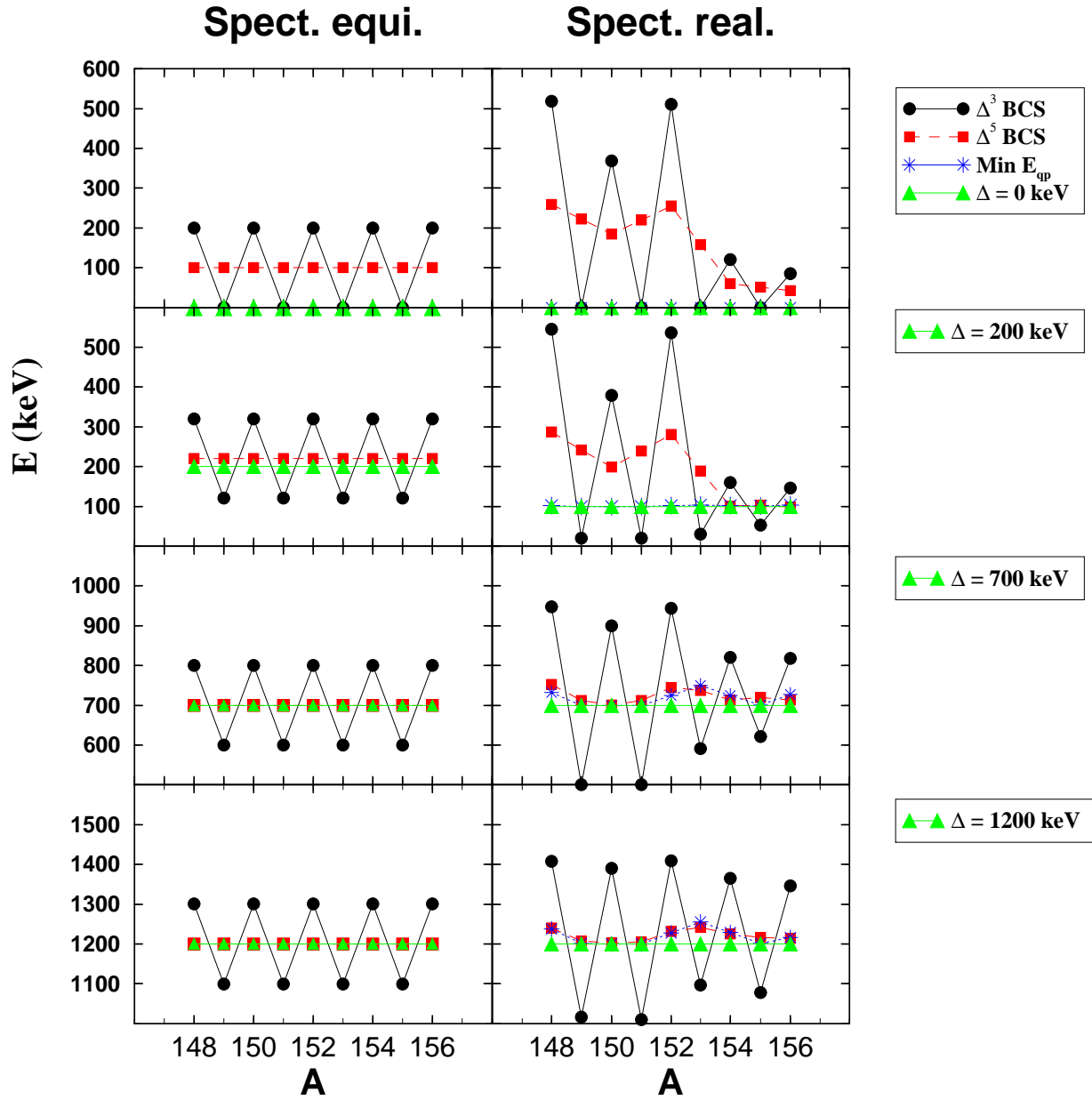


FIG. 9.2 – $\Delta_{BCS}^{(3)}$, $\Delta_{BCS}^{(5)}$ et Δ entre le ^{148}Ce et le ^{156}Ce . De haut en bas : le gap au niveau de Fermi croît de 0 à 1200 keV. Colonne de gauche : calcul réalisé avec un spectre équidistant, doublement dégénéré. Colonne de droite : calcul réalisé avec le spectre HF du ^{152}Ce . En plus de Δ , la q_p la plus basse dans le vide impair est donnée.

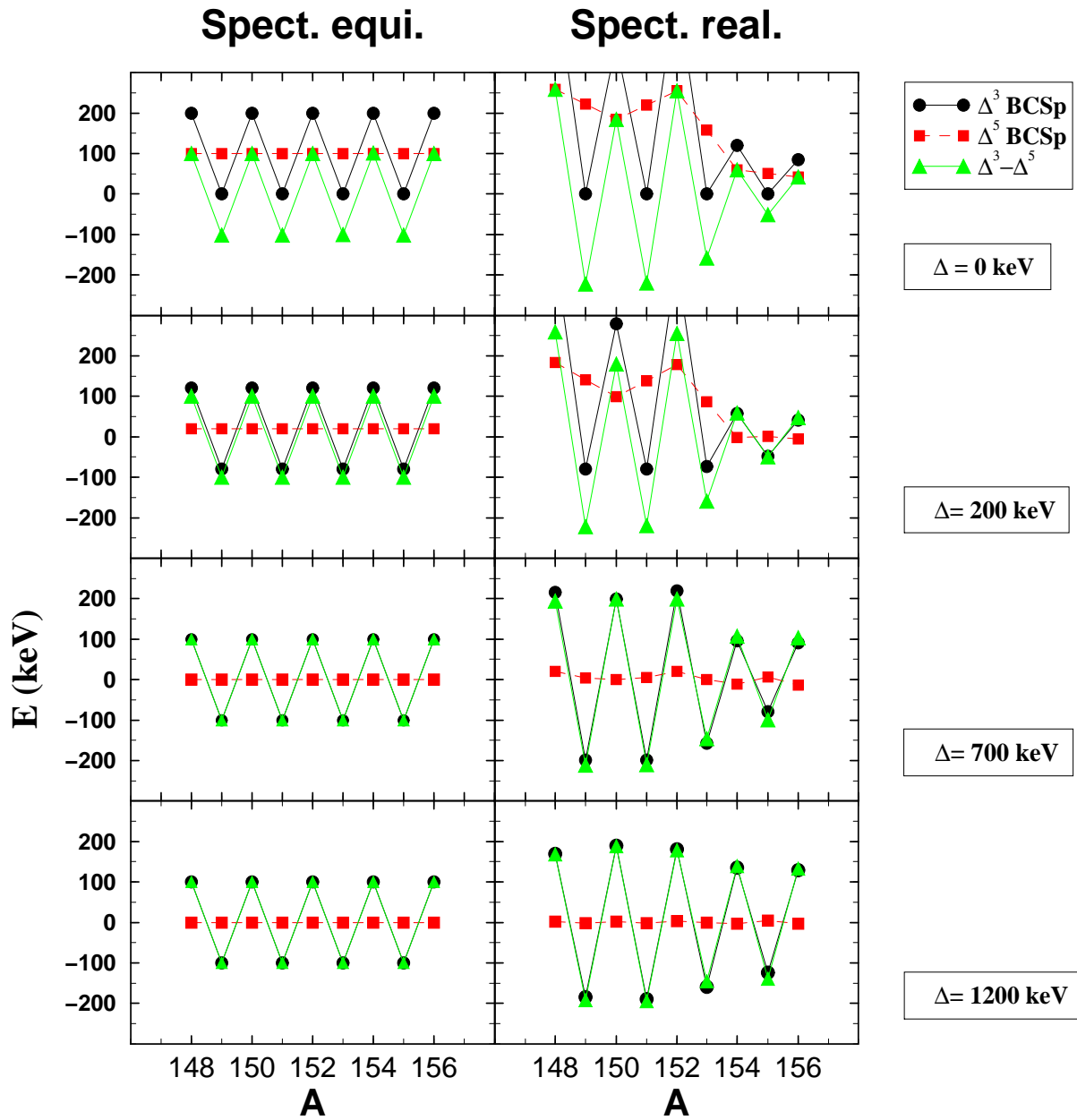


FIG. 9.3 – Différences de masses $\Delta_{BCSp}^{(3)}$, $\Delta_{BCSp}^{(5)}$ et $\Delta_{BCS}^{(3)} - \Delta_{BCS}^{(5)}$. Colonnes de gauche et de droite : mêmes conventions que pour la Fig. 9.2.

La colonne de droite de la Fig. 9.2 montre qu'un résultat qualitativement similaire est obtenu lorsque l'on fait usage du spectre HF, même si la régularité artificielle liée au spectre équidistant a disparu. D'un point de vue quantitatif, $\Delta_{BCS}^{(5)}$ extrait le gap au niveau de Fermi dès lors que celui-ci atteint 60 % de la valeur réaliste.

Ces résultats peuvent être compris à l'aide de la Fig. 9.3 qui donne la contribution de la partie paire de l'énergie \mathcal{E}^{BCSp} aux différences de masses précédentes. L'oscillation de $\Delta_{BCS}^{(3)}(N)$ autour de $\Delta_{BCS}^{(5)}(N)$ observée sur la Fig. 9.2 est également tracée. Pour $\Delta = 0$, les contributions $\Delta_{BCSp}^{(3,5)}$ sont égales à la valeur totale $\Delta_{BCS}^{(3,5)}$. En effet, le calcul au premier ordre des perturbations n'incluant pas la brisure de l'invariance par renversement du temps, les énergies \mathcal{E}^{BCS} et \mathcal{E}^{BCSp} d'un noyau impair sont égales pour $\Delta = 0$. On tire de cette égalité que l'oscillation de Jahn Teller des masses caractérisée par l'Eq. 9.2 et associée à la déformation du champ moyen est entièrement contenue dans la partie paire de l'énergie \mathcal{E}^{BCSp} . Il est alors possible de comprendre à l'aide de cette figure le changement de nature de l'oscillation de Jahn Teller lorsque l'appariement est enclenché dans le système. En effet, nous constatons la décroissance de $\Delta_{BCSp}^{(5)}$ vers 0 et le placement de l'oscillation de $\Delta_{BCSp}^{(3)}$ autour de cette valeur à mesure que le gap augmente. Ces quantités étant proportionnelles à des dérivées seconde et quatrième de \mathcal{E}^{BCSp} , cette évolution traduit l'adoucissement de l'énergie paire avec N . Ainsi, l'effet de déformation qui était asymétrique dans la limite d'appariement nul est redistribué de manière égale sur les $\Delta^{(3)}(N)$ pair et impair lorsque l'appariement augmente dans le système, de telle sorte que $\Delta_{BCS}^{(3)}$ oscille autour de $\Delta_{BCS}^{(5)}$ qui extrait le gap.

Nous sommes finalement en mesure de comprendre pourquoi $\Delta_{BCS}^{(5)}(N)$ extrait mieux le gap que $\Delta_{BCS}^{(3)}(impair)$ [113], et ce à l'inverse du résultat obtenu dans la limite d'appariement nul [162]. Cela est dû à l'évolution opposée avec l'appariement de la contribution à $\Delta_{BCS}^{(5)}(N)$ provenant des deux parties de l'énergie. Tandis que $\Delta_{BCSp}^{(5)}$ décroît d'une valeur non nulle vers une valeur nulle, le non appariement du nucléon célibataire fournit une contribution croissante à toutes les formules de différence de masses. De son côté, $\Delta^{(3)}(impair)$ récupère une contribution de l'oscillation de Jahn Teller qui était toute entière contenue dans $\Delta^{(3)}(pair)$ à la limite d'appariement nul. La prise en compte de la brisure de l'invariance par renversement du temps substituera l'extraction de $\Delta + E^{pol}$ par $\Delta^{(5)}$ à celle de Δ dans le cas présent.

La Fig. 9.4 traduit visuellement la situation que nous venons de décrire. Elle donne une représentation schématique des énergies \mathcal{E}^{HFB} et \mathcal{E}^{HFBp} en fonction de N dans le cas de l'appariement nul (gauche) et dans le cas de l'appariement réaliste (droite). Ce dessin correspond à un spectre sous-jacent doublement dégénéré typique d'un noyau déformé. Sur le dessin de gauche, l'énergie paire \mathcal{E}^{HFP} n'est pas une fonction lisse de N et l'énergie vraie d'un impair ne diffère de celle-ci que si la brisure de l'invariance par renversement du temps est incluse. La dégénérescence de Kramers est responsable de la décroissance linéaire de \mathcal{E}^{HFBp} entre deux noyaux pairs tandis que l'écart entre les niveaux doublement dégénérés est responsable du changement de pente induisant l'oscillation de Jahn Teller des masses selon l'Eq. 9.2. Dans le cas d'un appariement réaliste, l'énergie paire \mathcal{E}^{HFBp} devient lisse avec N et la rupture de pente associée à la dégénérescence de Kramers n'est plus visible sur l'énergie totale. L'effet de la déformation sur le spectre sous-jacent est redistribué en proportion égale sur tous les noyaux donnant lieu à des $\Delta_{BCSp}^{(3)}$ pair et impair non nuls et

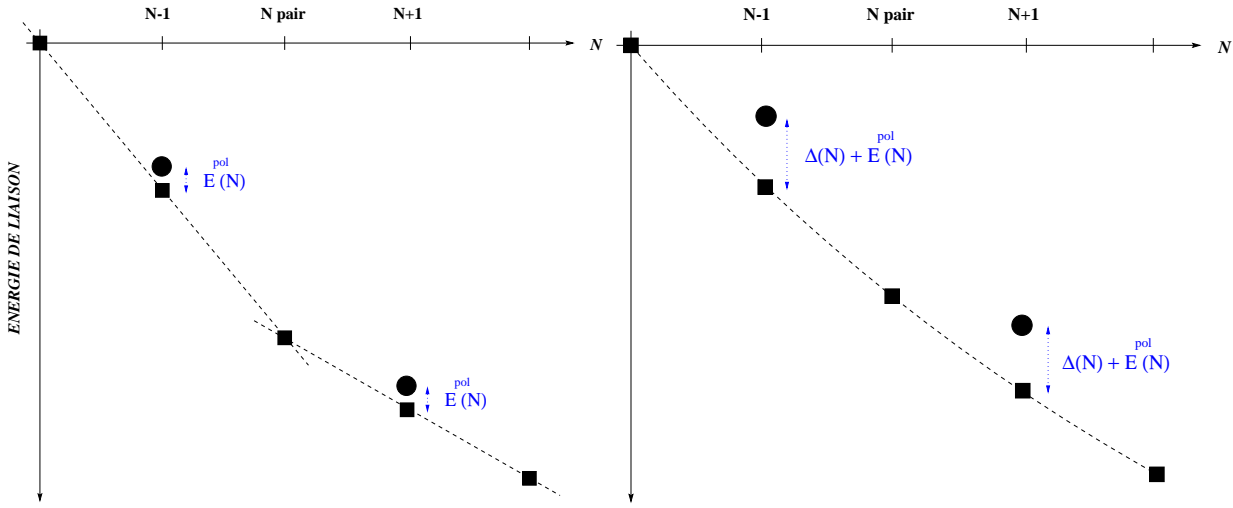


FIG. 9.4 – Évolution de la partie paire de l'énergie $\mathcal{E}^{HFBp}(N)$ (ligne pointillée et carrés) et de l'énergie vraie $\mathcal{E}^{HFB}(N)$ (carrés pour les pairs, ronds pour les impairs) en fonction du nombre de nucléon. À gauche : appariement nul ; à droite : appariement réaliste.

opposés. Il est donc clair que l'oscillation de Jahn Teller ne peut être transposée au cas de l'appariement réaliste tel qu'il existe dans la limite d'appariement nul. Dans le même temps, la vraie énergie de l'impair diffère de sa partie paire par une plus grande énergie $\Delta + E^{pol}$ donnant naissance à l'oscillation des masses associée à l'appariement et à la brisure de l'invariance par renversement du temps, précisément extraite par $\Delta_{BCS}^{(5)}$.

9.4 Isotopes d'étain.

Nous utilisons maintenant le modèle schématique avec le spectre HF de neutrons du ^{122}Sn . La Fig. 9.5 donne les mêmes quantités que la Fig. 9.2 entre le ^{118}Sn et le ^{126}Sn , le gap variant de 0 à 1900 keV. Cette dernière valeur correspond au gap théorique au niveau de Fermi obtenu dans un calcul HFB auto-cohérent du ^{122}Sn . Comme prévu, aucune oscillation du $\Delta_{BCS}^{(3)}$ n'est observée dans le calcul pour Δ égal 0, mis à part lors du passage de la couche sphérique 2d3/2 à la couche 1h11/2 se produisant pour $N = 120$.

À mesure que Δ augmente (de haut en bas sur la Fig. 9.5), deux modifications se produisent simultanément sur les différences de masses pair-impair. L'apparition d'une oscillation de $\Delta_{BCS}^{(3)}$ d'une part, et l'extraction de $\text{Min}\{E_k^{qp}\}$ par $\Delta_{BCS}^{(5)}$ d'autre part. L'écart observé pour certains noyaux entre Δ et $\text{Min}\{E_k^{qp}\}$ est dû au fait que la qp créée perturbativement sur le vide de nombre parité pair n'est pas toujours telle que $u_n^2 - v_n^2$ est exactement nul. Ainsi, un calcul permettant d'imposer le bon nombre de particules dans l'état à une qp ramènerait $\Delta_{BCS}^{(5)}$ et $\text{Min}\{E_k^{qp}\}$ vers Δ et $\Delta_{BCS}^{(3)}$ (impair) sous cette quantité. Comme pour les noyaux déformés, le comportement oscillant de $\Delta_{BCS}^{(3)}$ est directement relié à la contribution de la partie paire de l'énergie. La transition d'une situation où aucune oscillation de $\Delta_{BCS}^{(3)}$ n'existe à celle où une oscillation apparaît montre encore plus clairement que les résultats des calculs en présence d'appariement ne sont pas

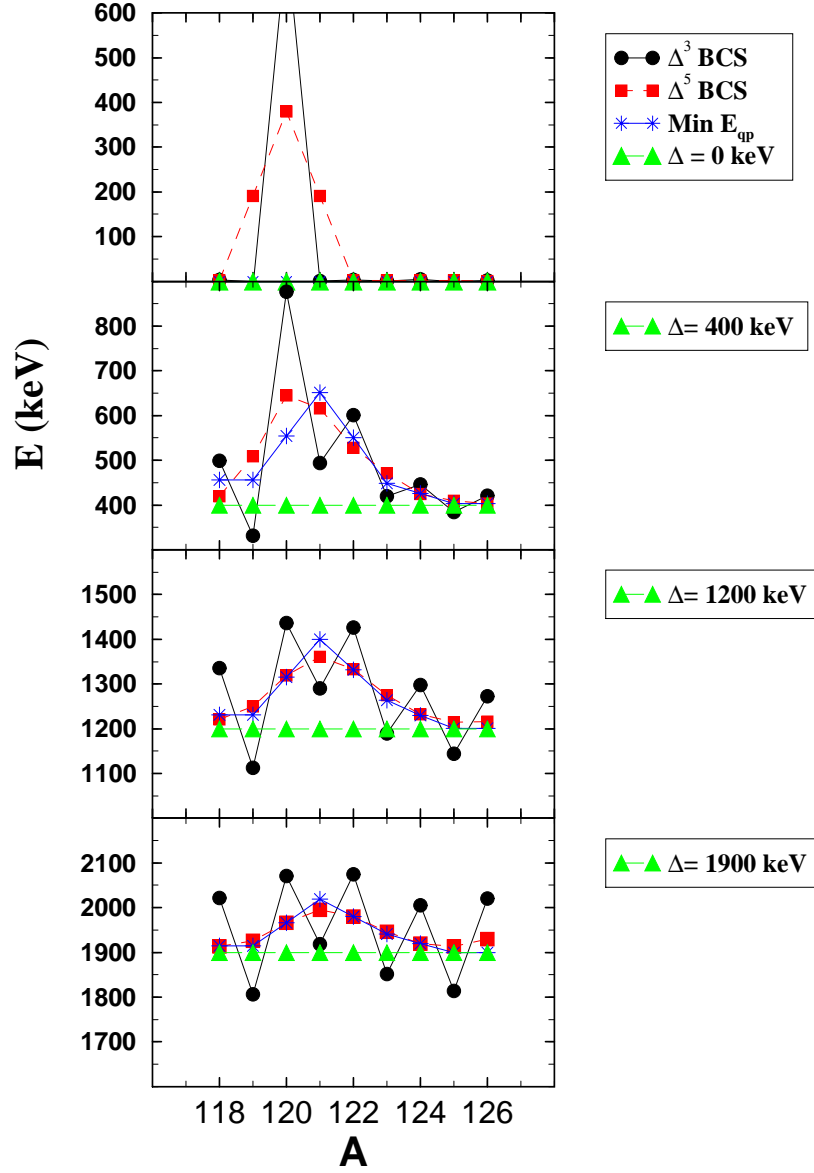


FIG. 9.5 – Mêmes courbes que sur la Fig.9.2 dans le cas des isotopes d'étain. Le spectre HF de neutron du ^{122}Sn est utilisé. Les résultats sont donnés entre le ^{118}Sn et le ^{126}Sn .

une simple extrapolation de ceux obtenus à la limite d'appariement nul.

9.5 Rôle du spectre de particules indépendantes.

En vertu de l'Eq. 9.2, il a été suggéré dans la Ref. [162] que l'oscillation de $\Delta^{(3)}$ pouvait être utilisée comme une mesure de l'écart autour du niveau de Fermi dans le spectre à une particule des noyaux pair-pair. Afin d'étudier cette proposition, nous comparons ces deux quantités sur la Fig. 9.6 pour un appariement nul d'une part et réaliste d'autre part. La colonne de gauche présente les résultats du calcul pour les isotopes de cérium avec le spectre équidistant tandis que celle du milieu correspond au spectre réaliste. La colonne de droite montre la ligne des étains. L'évolution du potentiel chimique est également superposée à chacun des spectres correspondants.

Dans le cas du spectre équidistant, l'écart dans le spectre est exactement reproduit par l'oscillation des $\Delta^{(3)}$, quelque soit la valeur du gap entre $\Delta = 0$ et 1200 keV. Ce résultat suggère qu'une information sur le spectre neutron (resp. proton) puisse effectivement être extraite par des différences de masses le long d'une ligne isotopique (resp. isotonique) quelque soit l'intensité de l'appariement dans le système. D'un autre côté, l'usage du spectre réaliste nous révèle que cette conclusion n'est valable que dans la limite d'appariement nul. En effet, l'oscillation de $\Delta^{(3)}$ n'est plus une mesure de $(\epsilon_n - \epsilon_{n-1})/2$ dès lors que Δ atteint 60% de sa valeur réaliste. Ce dernier résultat est confirmé par le calcul des isotopes d'étain où une oscillation des $\Delta^{(3)}$ apparaît lorsque Δ augmente alors même que le spectre individuel reste hautement dégénéré.

L'ensemble des résultats précédents s'explique par la façon dont un nucléon est ajouté dans la structure de nombre parité pair (voir section 8.2) selon que l'appariement est ou non pris en compte. Partant de la limite d'appariement nul et augmentant son intensité, l'énergie associée à l'ajout d'un nucléon est de moins en moins reliée à une énergie individuelle donnée. Le nucléon ajouté est réparti sur l'ensemble de la mer de Fermi en raison de la diffusion de paires. Pour les noyaux déformés, cela induit une perte de mémoire du spectre sous-jacent et un comportement plus lisse de $\mathcal{E}^{HF Bp}$ avec N (voir Fig 9.4). Pour les noyaux sphériques, la Fig. 9.6 montre que la diffusion de paires implique plusieurs sous-couches sphériques dans le processus d'ajout du nucléon à partir d'une certaine intensité de l'appariement. Tandis que le spectre reste hautement dégénéré, cet effet induit une oscillation de $\Delta^{(3)}$ de type Jahn Teller inexistante dans la limite d'appariement nul.

La rangée du bas de la Fig. 9.6 illustre ce propos en montrant l'évolution du potentiel chimique dans l'état de nombre parité pair. Considérons les deux cas où un spectre réaliste est utilisé. Pour $\Delta = 0$, λ est sensible aux orbites individuelles, tandis que pour $\Delta_{realiste}$ il croît sans refléter la structure du spectre sous-jacent. Etant donnée l'identité

$$\Delta_{BCS}^{(3)}(N = 2j) - \Delta_{BCS}^{(3)}(N + 1) \approx \frac{\partial^2 E^{BCSp}}{\partial N^2} \approx \frac{\partial \lambda}{\partial N} \quad , \quad (9.9)$$

on comprend que plus aucune information sur le spectre de particules ne puisse être extraite de l'oscillation de $\Delta^{(3)}$ en présence d'un appariement réaliste. D'une manière générale, la trace du spectre est perdue avant même que le gap ne dépasse la valeur de tous les écarts dans le spectre autour du niveau de Fermi. Par exemple, tandis que

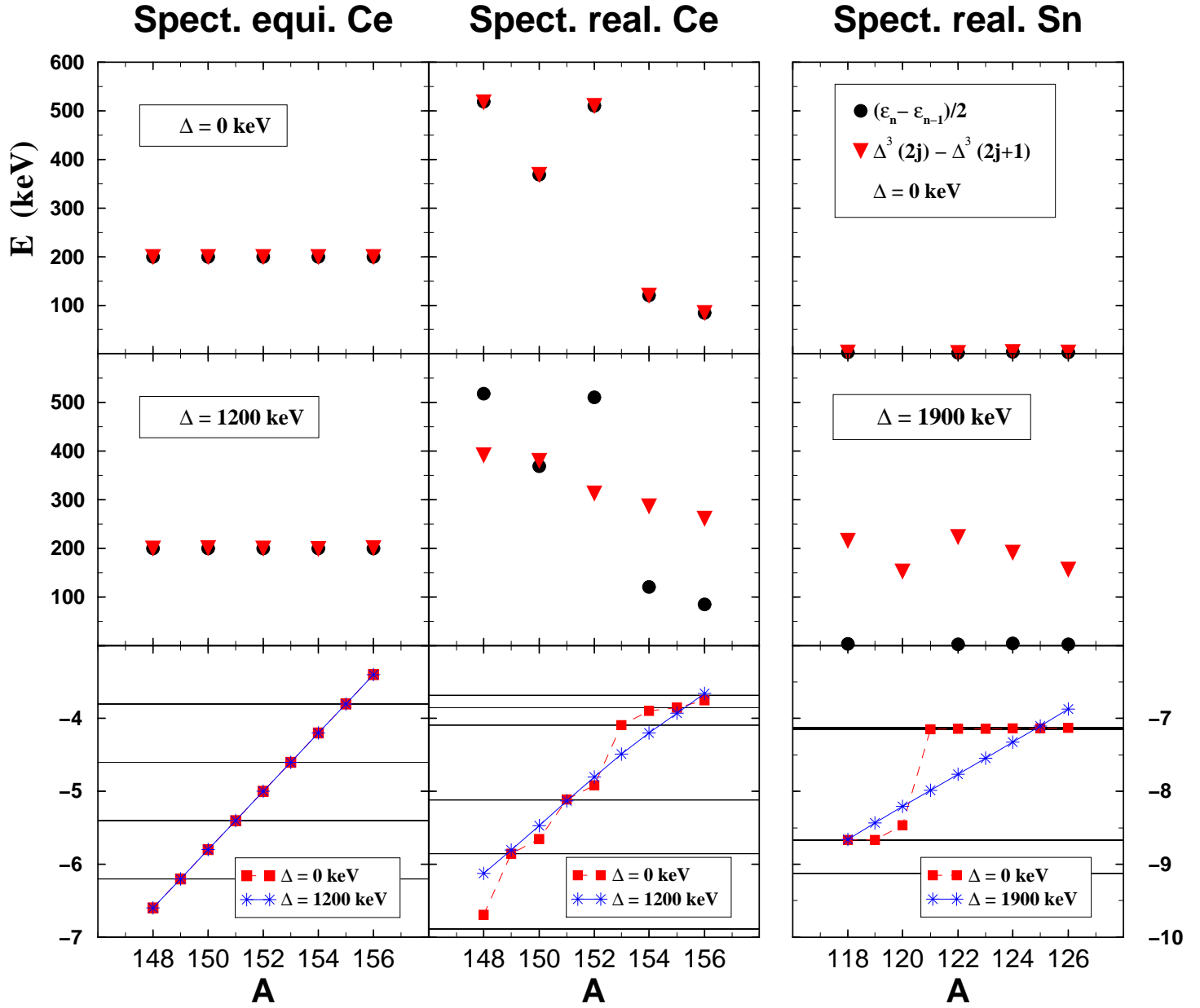


FIG. 9.6 – Rangées supérieures : $\Delta_{BCS}^{(3)}(2j) - \Delta_{BCS}^{(3)}(2j+1)$ est comparée au splitting au niveau de Fermi $(\epsilon_{n+1} - \epsilon_n)/2$ pour deux valeurs extrêmes du gap (haut : $\Delta = 0$; milieu : $\Delta_{realiste}$). Le splitting de 1.5 MeV correspondant au ^{120}Sn est en dehors du cadre. Rangée inférieure : potentiel chimique (en MeV) en fonction de la masse.

$\delta\epsilon_F$ s'étale entre 200 keV et 1 MeV pour les noyaux étudiés ici, la trace de ces splitting en est perdue pour $\Delta = 700$ keV. De la même manière, la diffusion de paires est assez forte lorsque $\Delta = \Delta_{realiste}$ pour laver l'information concernant le gap de 1.5 MeV entre les couches sphériques 2d3/2 et 1h11/2 dans les isotopes d'étains avoisinant ^{132}Sn . L'ensemble des résultats portant sur les noyaux d'étain montre la limitation d'un modèle ne faisant usage que d'une seule couche j pour comprendre l'oscillation des masses dans les noyaux sphériques.

Pour finir, le graphique du bas à gauche de la Fig. 9.6 illustre la raison pour laquelle il semblait possible d'extraire une information sur le spectre équidistant par des différences de masses quelle que soit l'intensité de l'appariement. En effet, l'évolution de λ avec la masse reste identique quelle que soit la valeur de Δ . Le fait que le nucléon ajouté soit diffusé sur l'ensemble de la mer de Fermi lorsque Δ augmente n'a donc pas d'influence sur l'énergie qui lui correspond en raison de la symétrie artificielle du spectre. L'énergie ajoutée reste identique à celle de l'orbite sur laquelle le nucléon est mis en absence d'appariement. D'après l'Eq. 9.9, il est logique que l'oscillation de $\Delta^{(3)}$ extrait la même quantité qu'en l'absence d'appariement dans ce cas particulier. Cette dernière remarque montre les limites inhérentes aux modèles schématiques faisant usage de spectres trop particuliers.

Le modèle schématique couplé au schéma pair-impair développé dans ce travail nous ayant permis de comprendre la physique de l'oscillation des masses, nous passons à présent aux résultats des calculs auto-cohérents afin de valider l'analyse précédente du point de vue quantitatif.

Chapitre 10

Calculs auto-cohérents.

10.1 Isotopes d'étain.

Les états fondamentaux de soixante-dix isotopes d'étain ont été calculés selon la même méthode que ceux de cérium. En raison du nombre magique de protons ($Z = 50$), tous ces isotopes sont sphériques dans nos calculs tri-dimensionnels.

Les formules $\Delta^{(3)}(N)$ et $\Delta^{(5)}(N)$ utilisant les masses théoriques et expérimentales sont tracées sur la Fig. 10.1. L'oscillation de $\Delta^{(3)}(N)$ est visible tant du point de vue des valeurs théoriques qu'expérimentales, les valeurs étant systématiquement plus faibles pour N impair que pour N pair. L'amplitude de cette oscillation diminue vers la drip-line neutron tandis que la valeur absolue des $\Delta^{(3)}(N)$ augmente. Ce dernier point est lié au caractère de surface de la force d'appariement utilisée, dont l'effet est magnifié dans les noyaux riches en neutron où le couplage au continuum est important [133]. Aucune oscillation n'est visible pour $\Delta^{(5)}(N)$.

Les formules de différence de masses théoriques surestiment les valeurs expérimentales de plusieurs centaines de keV et cela bien que la force d'appariement utilisée reproduise de façon satisfaisante les propriétés de rotation dans plusieurs régions de masse. Ce résultat est en partie dû à des problèmes de convergence dans le calcul de plusieurs noyaux impairs entre le ^{107}Sn et ^{125}Sn . Pour le reste, cette surestimation pourrait être corrigée par la prise en compte de corrélations au-delà du champ moyen [105] à condition que celles-ci aient un effet différent sur la masse des noyaux pair-impair et des noyaux pair-pair conformément à la discussion menée dans la section 4.2.6.

Sur la Fig. 10.2 est portée la contribution de la partie paire de l'énergie \mathcal{E}^{HFBp} aux formules de différence de masses théoriques. Le nombre magique $N = 82$ mis à part, nous constatons que :

$$|\Delta_{HFBp}^{(3)}| \gg |\Delta_{HFBp}^{(5)}| \quad (10.1)$$

$$\Delta_{HFBp}^{(3)}(2j) \approx -\Delta_{HFBp}^{(3)}(2j+1) \neq 0 \quad (10.2)$$

$$\Delta_{HFBp}^{(5)}(N) \approx 0 \quad (10.3)$$

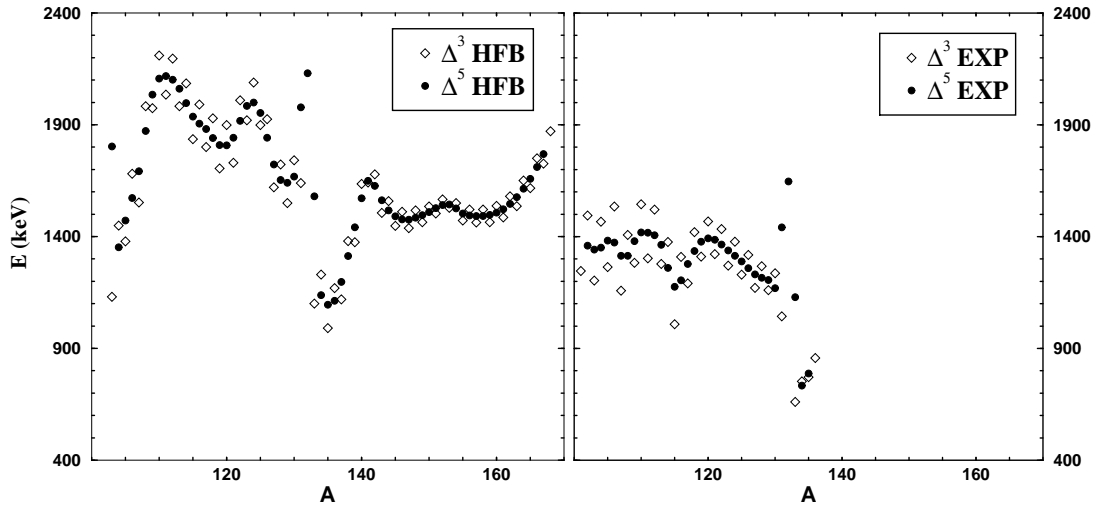


FIG. 10.1 – Graphique de gauche : $\Delta_{HFB}^{(3)}$ et $\Delta_{HFB}^{(5)}$ issus des calculs auto-cohérents pour la ligne isotopique d'étain entre le ^{100}Sn et le ^{169}Sn . Graphique de droite : différences de masses expérimentales. Les données sont issues de la Ref. [163].

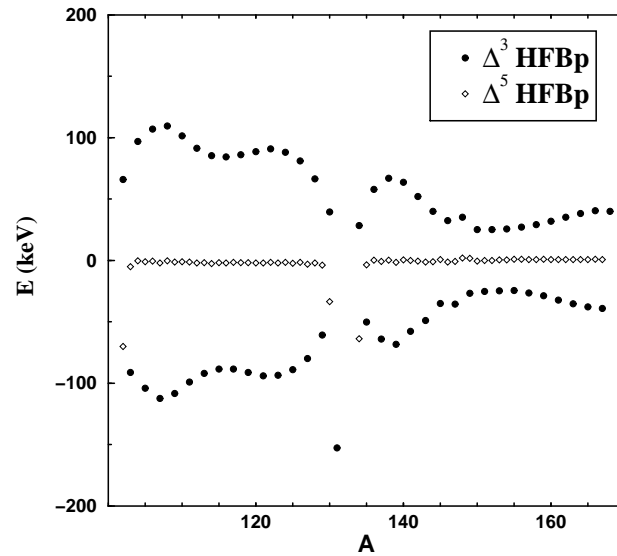


FIG. 10.2 – Contribution de la partie paire de l'énergie aux formules de différence de masses théoriques entre le ^{100}Sn et le ^{169}Sn .

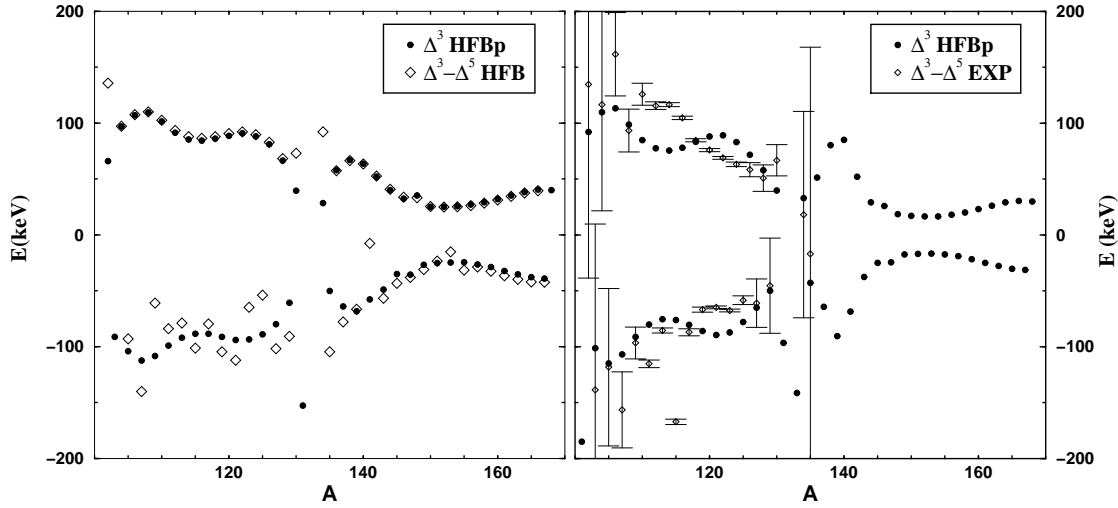


FIG. 10.3 – Gauche : $\Delta_{HFBp}^{(3)}$ et $\Delta_{HFB}^{(3)} - \Delta_{HFB}^{(5)}$ le long de la ligne isotopique d'étain. Droite : l'oscillation expérimentale de $\Delta^{(3)}$ autour de $\Delta^{(5)}$ est comparée à $\Delta_{HFBp}^{(3)}$.

Ces résultats prouvent du point de vue des calculs réalistes que l'intensité de l'appariement dans le système est telle que la limite asymptotique décrite dans le modèle schématique est atteinte. En effet, l'Eq. 10.1 montre que les dérivées successives de l'énergie paire chute rapidement avec l'ordre, prouvant ainsi que cette énergie est lisse avec N . L'Eq. 10.2 confirme ce point et démontre que plusieurs couches sphériques doivent contribuer au processus d'ajout d'un nucléon. Dans le cas inverse, $\Delta_{HFBp}^{(3)}$ serait nul pour des isotopes sphériques. Enfin, l'Eq. 10.3 permet d'obtenir les identités :

$$\Delta_{HFB}^{(3)}(N) - \Delta_{HFB}^{(5)}(N) \approx \Delta_{HFBp}^{(3)}(N) \quad (10.4)$$

$$\Delta_{HFB}^{(5)}(N) \approx \Delta_{app+pol}^{(5)}(N). \quad (10.5)$$

Les deux membres de l'Eq. 10.4 sont comparés sur la partie gauche de la Fig. 10.3. L'accord est excellent tout le long de la ligne isotopique (excepté bien sûr pour le nombre magique $N = 82$). Cette comparaison illustre la responsabilité de la partie paire de l'énergie dans le comportement oscillant de $\Delta^{(3)}$ autour de $\Delta^{(5)}$. Ce résultat confirme du même coup la validité de l'Eq 10.5 traduisant l'extraction de l'énergie de qp $\Delta_{app+pol}^{(5)}(N) \approx [\Delta + E^{pol}](N)$ par $\Delta^{(5)}$ et le fait que $\Delta^{(3)}(N)$ contient une contribution additionnelle incluant en particulier l'entière contribution de l'énergie d'asymétrie à l'oscillation des masses.

La partie droite de la Fig. 10.3 propose la comparaison entre $\Delta_{HFBp}^{(3)}$ et $\Delta_{Exp}^{(3)} - \Delta_{Exp}^{(5)}$. De nouveau, l'accord est très bon. Ainsi, la surestimation des différences de masses expérimentales absolues n'empêche en rien l'oscillation de $\Delta_{Exp}^{(3)}$ autour de $\Delta_{Exp}^{(5)}$ d'être parfaitement reproduite par la contribution de l'énergie théorique paire. Ce résultat est une façon supplémentaire de montrer le découplage entre les deux composantes de l'énergie de liaison des noyaux impairs.

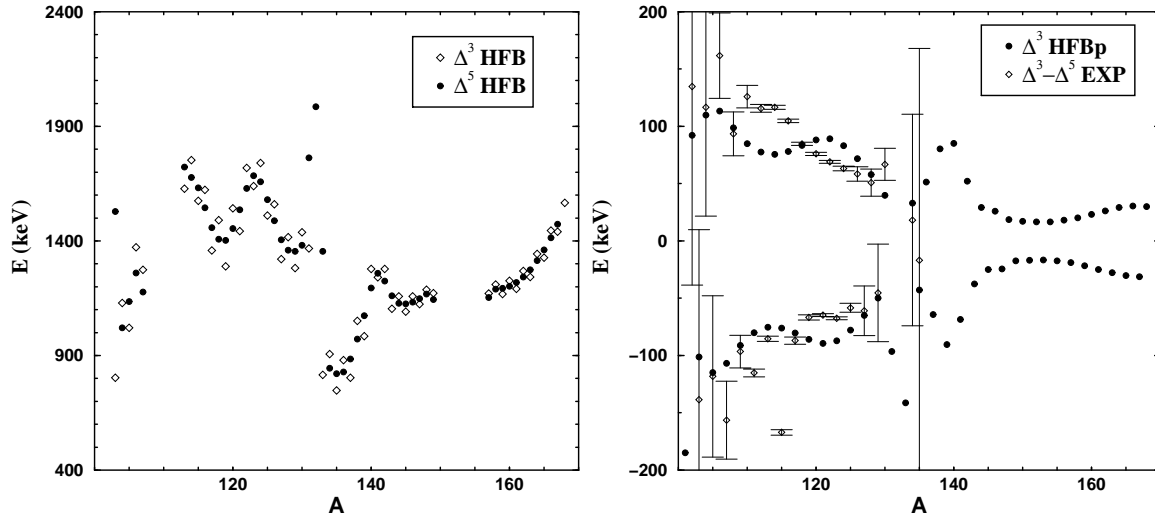


FIG. 10.4 – Gauche : $\Delta_{HFB}^{(3)}$ et $\Delta_{HFB}^{(5)}$ théoriques calculées avec une intensité réduite de la force d'appariement neutron $V_n = -1000 \text{ MeV.f.m}^{-3}$. Droite : comparaison de $\Delta_{HFBp}^{(3)}$ avec $\Delta_{EXP}^{(3)} - \Delta_{EXP}^{(5)}$ pour la même valeur de V_n .

Afin de confirmer ce découplage, nous avons refait le calcul en réduisant l'intensité de la force d'appariement neutron de 20% ($V_n = -1000 \text{ MeV.f.m}^{-3}$). La partie gauche de la Fig. 10.4 montre la réponse des différences de masses absolues. Quelques points manquent en raison de difficultés de convergence. On constate une diminution de 20 % en moyenne des différences de masses par rapport au premier calcul, montrant ainsi le lien direct entre la valeur du gap et l'intensité de la force. En revanche, la partie de droite de cette même figure montre que l'oscillation de $\Delta_{HFB}^{(3)}$ engendrée par la partie paire de l'énergie n'est pas modifiée en substance. Cela prouve une nouvelle fois le découplage existant entre l'énergie de qp extraite par $\Delta^{(5)}$ et la partie paire de l'énergie contribuant à $\Delta^{(3)}$.

10.2 Isotopes de cérium.

Revenons maintenant aux noyaux déformés de cériums. D'après la section 8.2, l'état de nombre parité pair $|\Phi^{HFBp}(N+1)\rangle$ présente le même champ moyen, et notamment la même déformation¹ que l'état fondamental $|\Phi_n^{HFB}(N+1)\rangle$. De fait, il a été démontré à l'aide du modèle schématique que l'oscillation de Jahn Teller des masses était contenue dans $\Delta_{HFBp}^{(n)}$. Etudions cette contribution dans le cas des calculs auto-cohérents afin de définir une quantité indépendante de la déformation.

Sur la Fig. 10.5 sont tracées les différences de masses $\Delta_{HFB(p)}^{(3)}$ et $\Delta_{HFB(p)}^{(5)}$. La comparaison entre $\Delta_{HFB}^{(3)} - \Delta_{HFB}^{(5)}$ et $\Delta_{HFBp}^{(3)}$ est présentée sur la Fig. 10.6. Les résultats sont identiques en tous points à ceux concernant les isotopes d'étain : $|\Delta_{HFBp}^{(3)}|$ est beaucoup

¹ Cela concerne la déformation responsable du caractère doublement dégénéré pour un noyau pair-pair. La légère déformation supplémentaire qui accompagne la levée de dégénérescence de Kramers dans un impair est incluse dans E^{pol} .

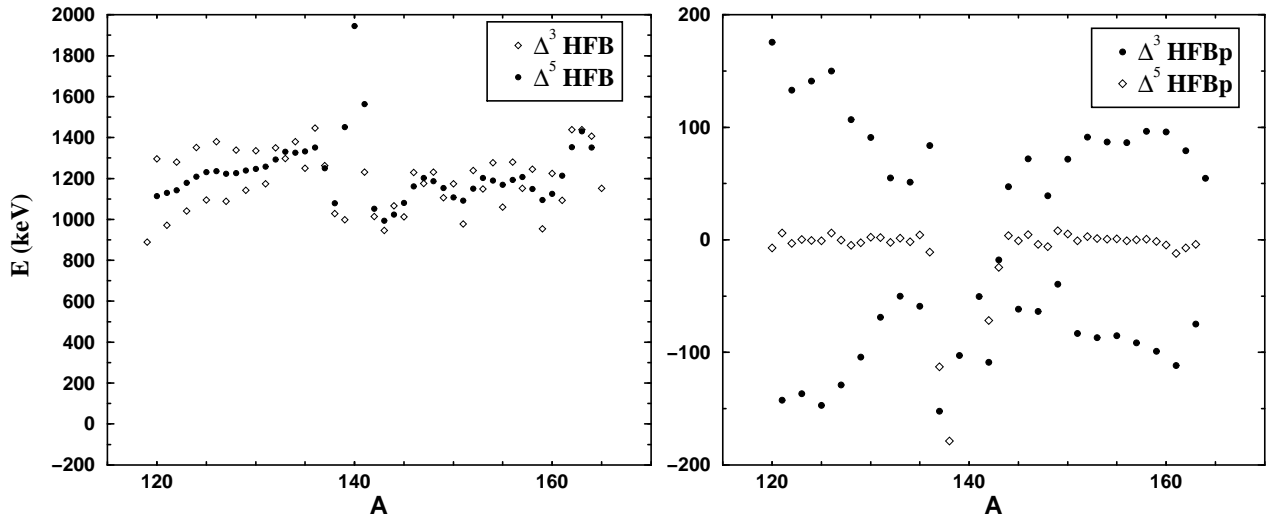


FIG. 10.5 – Gauche : $\Delta_{HFB}^{(3)}$ et $\Delta_{HFB}^{(5)}$ issus des calculs auto-cohérents pour la ligne isotopique de cérium entre le ^{118}Ce et le ^{166}Ce . Droite : contribution de la partie paire de l'énergie à ces formules de différence de masse.

plus grand que $|\Delta_{HFBp}^{(5)}|$ qui est proche de zéro. L'oscillation de $\Delta_{HFB}^{(3)}$ autour de $\Delta_{HFB}^{(5)}$ est reproduite par $\Delta_{HFBp}^{(3)}(N)$. De la même manière que pour les noyaux sphériques, l'énergie de qp $[\Delta + E^{pol}](N)$ est donc extraite par $\Delta^{(5)}$ sans être polluée par un effet de déformation. L'oscillation de Jahn Teller associée à la partie paire de l'énergie contribue de la même façon (au signe près) à $\Delta^{(3)}$ pour N pair ou impair. Cela prouve que l'appariement dans ces noyaux est suffisamment fort pour placer le système dans la limite asymptotique mise en exergue à l'aide du modèle schématique. Notons qu'il n'est pas possible d'effectuer une comparaison signifiante avec les valeurs expérimentales pour ces noyaux déformés car les barres d'erreur expérimentales sont trop importantes.

Plaçons nous maintenant dans la limite d'appariement nul afin d'obtenir le pendant quantitatif de l'étude schématique. Les corrélations d'appariement dans le système sont graduellement enclenchées à travers l'augmentation progressive de l'intensité de la force V_n jusqu'à sa valeur réaliste. La Fig. 10.7 donne les mêmes quantités que les Fig. 9.2 et 9.3. Au lieu de l'énergie de qp BCS au premier ordre des perturbations, l'énergie de qp auto-cohérente $\mathcal{E}^{HFB} - \mathcal{E}^{HFBp}$ étudiée dans la section 8.4.2 est maintenant tracée. Le graphique du haut rappelle que cette énergie de qp est non nulle dans la limite d'appariement nul puisqu'elle inclue l'effet de la brisure de l'invariance par renversement du temps qui contribue à toutes les formules de différence de masses.

Concentrons nous d'abord sur la contribution de la partie paire aux différences de masses pour un appariement nul $V_n = 0$ (graphique en haut à droite). Les quantités correspondantes n'incluent ni appariement, ni brisure de l'invariance par renversement du temps, ce qui permet de mettre en relief les effets liés à l'auto-cohérence des calculs. Contrairement aux calculs schématiques, $\Delta_{HFBp}^{(3)}(\text{impair})$ est le plus souvent non nul (plusieurs centaines de keV par exemple entre le ^{145}Ce et le ^{149}Ce). Ainsi, le réarrangement modifie significativement la situation par rapport à l'image de pures particules indépendantes,

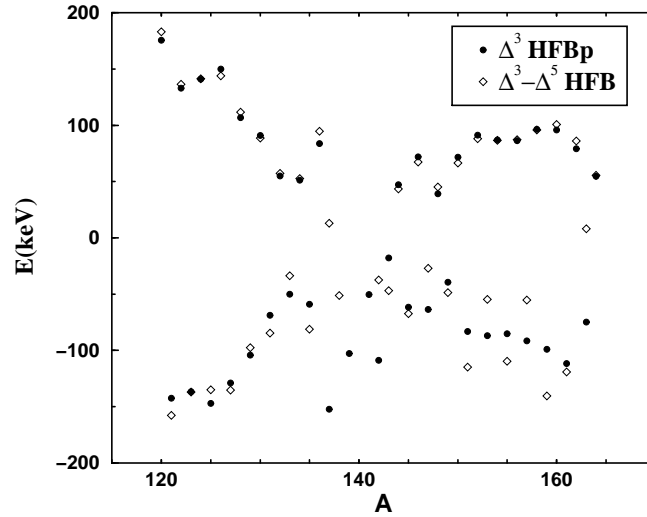


FIG. 10.6 – Comparaison entre $\Delta_{HFBp}^{(3)}$ et $\Delta_{HFB}^{(3)} - \Delta_{HFB}^{(5)}$ le long de la ligne isotopique de cérium.

notamment lorsque la déformation varie [162, 146]. De ce fait, il n'est déjà pas possible de dire à ce niveau que $\Delta_{HFBp}^{(3)}(impair)$ extrait le gap (nul). La seule affirmation valable d'après le graphique en haut à gauche de la Fig. 10.7 est qu'une oscillation pair-impair des masses est observée à la limite d'appariement nul à travers la formule de masse à trois points $\Delta_{HF}^{(3)}$, elle même oscillante, et que la formule à cinq points $\Delta_{HF}^{(5)}$ est non nulle pour tout N . Il est également possible de dire que $\Delta_{HF}^{(3)}(impair)$ est plus proche de l'énergie de qp E^{pol} que $\Delta_{HF}^{(5)}$.

Cependant, lorsque l'appariement croît, $\Delta_{HFB}^{(5)}$ tend à extraire l'énergie de qp $\Delta + E^{pol}$. De son côté, $\Delta_{HFB}^{(3)}$ oscille autour de cette valeur en raison de la contribution de la partie paire de l'énergie comme le montre la colonne de droite. Cette limite est atteinte dès lors que l'intensité de la force vaut 72% de sa valeur ajustée ($V_n = -900 \text{ MeV.fm}^{-3}$). Il est essentiel de noter que ces conclusions sont valables malgré le réarrangement lié à l'auto-cohérence et au changement de déformation, et cela sur l'ensemble de la ligne isotopique.

10.3 Rôle du spectre de particules indépendantes.

Nous en venons maintenant du point de vue des calculs auto-cohérents à la possibilité éventuelle d'extraire des informations sur le spectre de particules indépendantes à partir des formules de différence de masses comme suggéré dans la Ref. [162].

La partie de gauche (resp. droite) de la Fig. 10.8 compare l'amplitude de l'oscillation de $\Delta_{HFB}^{(3)}$ et $\Delta_{HFBp}^{(3)}$ (resp. $\Delta_{HF}^{(3)}$ et $\Delta_{HFBp}^{(3)}$) à l'écart au niveau de Fermi dans le spectre HF des isotopes pair-pair impliqués. Les oscillations de $\Delta_{HF(B)}^{(3)}$ et de $\Delta_{HF(B)p}^{(3)}$ coïncident dans les deux cas quels que soient les effets de réarrangement. Cela montre de nouveau comment cette oscillation trouve son origine dans la partie paire de l'énergie de liaison.

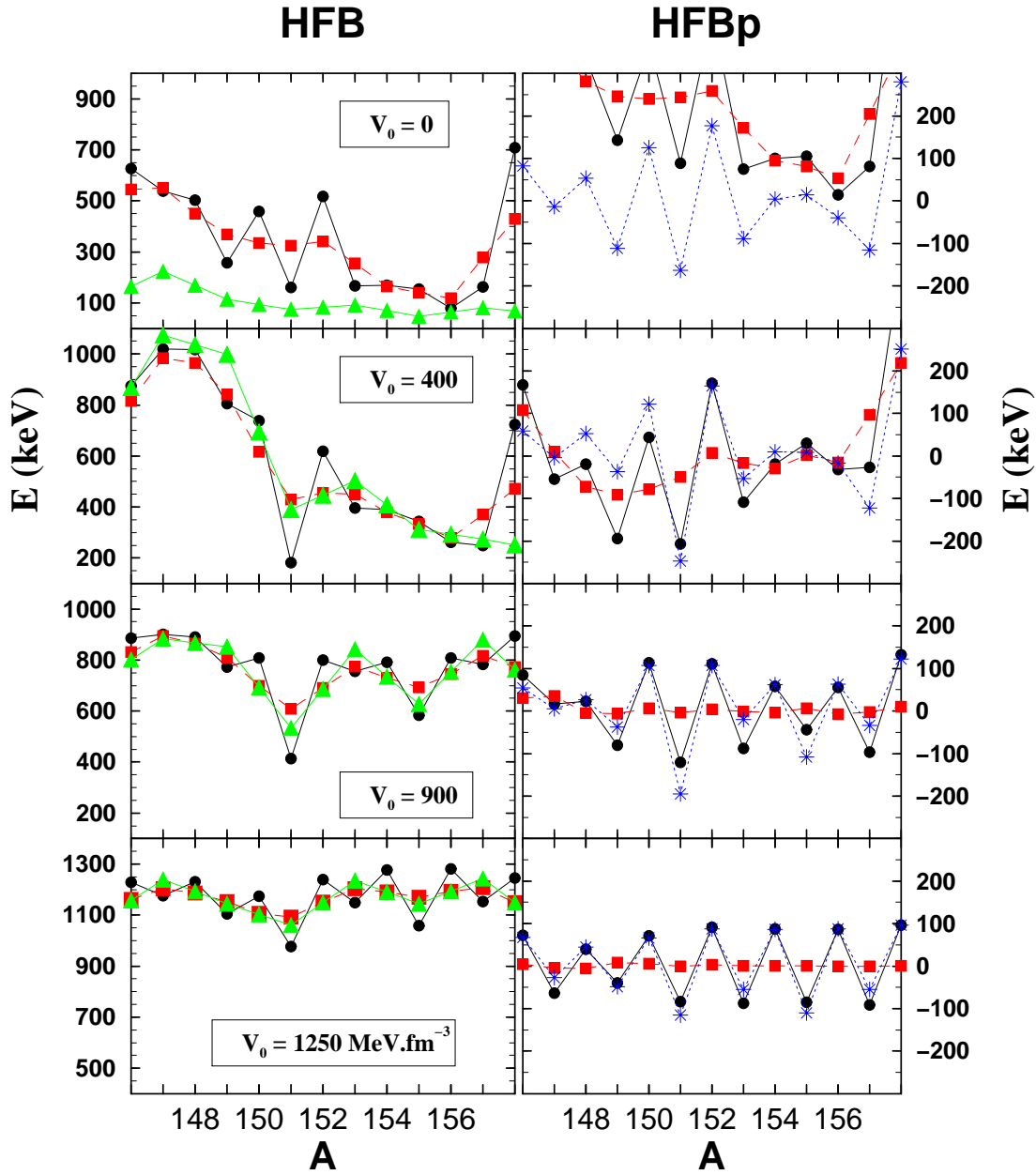


FIG. 10.7 – Colonne de gauche (droite) : $\Delta_{HFB(p)}^{(3)}$ (ligne pleine et cercles), $\Delta_{HFB(p)}^{(5)}$ (ligne tirée et carrés), énergie de qp auto-cohérente $\mathcal{E}^{HFB} - \mathcal{E}^{HFBp}$ (ligne pointillée et triangles) et $\Delta_{HFB}^{(3)} - \Delta_{HFB}^{(5)}$ (ligne pointillée et étoiles). De haut en bas, l'intensité de la force d'appariement neutron croît depuis 0 jusqu'à 1250 MeV.fm^{-3} . Les résultats sont donnés entre le ^{148}Ce et ^{156}Ce .

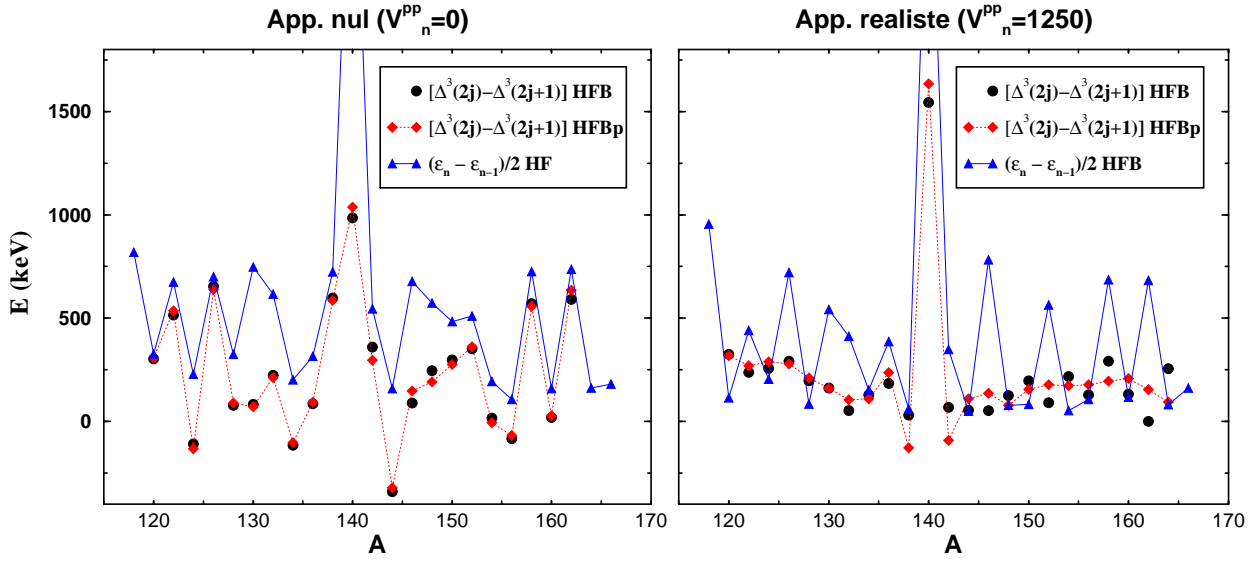


FIG. 10.8 – Amplitude de l'oscillation de $\Delta_{HF(B)}^{(3)}$ et de $\Delta_{HF(B)p}^{(3)}$ comparée à l'écart $(\epsilon_n - \epsilon_{n-1})/2$ au niveau de Fermi dans le spectre HF le long de la ligne isotopique de cérium. Gauche : appariement nul. Droite : appariement réaliste.

Dans le cas de l'appariement nul, l'oscillation de $\Delta_{HF}^{(3)}$ reproduit grossièrement, en accord avec l'Eq. 9.2, l'écart au niveau de Fermi dans le spectre HF correspondant. Il faut exclure de cette remarque la zone où la déformation varie rapidement (entre le ^{124}Ce et le ^{152}Ce) du fait du réarrangement important se produisant alors dans le spectre entre un noyau et ses voisins.

Lorsqu'un appariement réaliste est considéré, nous utilisons les valeurs propres $\epsilon_k^{V_n \neq 0}$ du champ HF des isotopes pairs se déduisant des valeurs propres correspondantes $\epsilon_k^{V_n = 0}$ par continuité. Comme le montre la partie droite de la Fig. 10.8, plus aucune information sur le spectre HF n'est extraite par l'oscillation de $\Delta_{HF(B)p}^{(3)}$. En effet, l'addition du nucléon n'est plus reliée à une orbite particulière lorsque l'appariement est enclenché.

En conclusion, nous pouvons affirmer que toutes les informations qualitatives tirées du modèle schématique sont validées du point de vue quantitatif par les résultats des calculs auto-cohérents.

10.4 Autres régions de masse.

Les résultats obtenus dans les sections précédentes reposent sur des calculs dans la région de masse $A = 100-170$. Cependant, nous nous attendons à ce que ces conclusions soient également valables pour les noyaux plus légers. En effet, le régime dans lequel le système se trouve dépend du rapport typique $\Delta_F/\delta\epsilon_F$. Nous avons montré dans le modèle schématique que la limite asymptotique (régime "corrélé") est atteinte pour une valeur de ce rapport de l'ordre de 0.5. Dans les calculs auto-cohérents, cette limite est atteinte pour une intensité de la force fournissant une valeur similaire de ce rapport au niveau de Fermi. Cette constatation prêche en faveur du régime corrélé dans la région de masse $A =$

30-100 où $\Delta_F/\delta\epsilon_F$ est typiquement entre 0.5 et 1 en milieu de couche. Afin d'appuyer cet argument, nous avons procédé à un calcul exploratoire pour les isotopes de magnésium entre le ^{20}Mg et le ^{28}Mg à l'aide du modèle BCS schématique. Nous avons pour cela utilisé le spectre et la valeur du gap au niveau de Fermi issus d'un calcul HFB du ^{24}Mg . Les résultats sont en faveur de l'extrapolation de nos conclusions à cette région de masse. Ce calcul montre également l'augmentation de la contribution moyenne de la partie paire à $\Delta^{(3)}$ liée à la dilatation du spectre dans cette région de masse. Ce résultat explique qualitativement l'augmentation bien connue de l'oscillation des $\Delta^{(3)}$ expérimentaux dans les noyaux légers (voir la Fig. 3 de la Ref. [162] par exemple).

En réalité, la seule limitation à apporter aux conclusions précédentes concerne les noyaux à une ou deux unités de masse des noyaux magiques. Ces noyaux se situent dans le régime intermédiaire où $\Delta^{(3)}(\textit{impair})$ est de la même qualité que $\Delta^{(5)}$ pour extraire l'énergie de qp (voir les graphiques supérieurs de la Fig. 9.2). Cela dit, cette limitation concerne des noyaux pour lesquels le traitement de l'appariement au niveau du champ moyen n'est pas suffisant. Ainsi, ces noyaux ne sont pas adaptés à l'étude des propriétés statiques de l'appariement ou pour ajuster des forces.

Chapitre 11

Extraction d'un gap d'appariement.

Il est maintenant temps de rassembler les résultats obtenus afin de proposer la formule de différence de masse la plus à même d'isoler des informations sur l'appariement. Pour cela, les objectifs que l'on est en droit de se fixer doivent être clairement définis. Tout d'abord, la présente étude se situant au niveau du champ moyen, c'est dans ce cadre, et dans ce cadre seulement, que l'on cherche ici à isoler l'information sur l'appariement. La problématique concernant d'éventuels effets au-delà de ce niveau d'approximation est reportée à la fin de la discussion. À l'approximation de champ moyen, il a été montré comment la différence de structure entre les noyaux pairs et les noyaux impairs est incluse dans la création d'une qp. L'objectif à atteindre est donc d'isoler un gap d'appariement, ou autrement dit, un élément diagonal particulier du champ d'appariement, contenu dans l'énergie de cette qp. Quatre questions sont à résoudre pour y parvenir : établir dans quelle mesure telle ou telle formule de différence de masses contient d'autres contributions que cette énergie de qp, combien d'énergies de qp sont en fait mélangées lorsque cette formule est utilisée, comment extraire de cette énergie la contribution de la brisure de l'invariance par renversement du temps, et enfin, quel est précisément l'élément de matrice du champ d'appariement isolé par cette formule de masses. L'étude présentée dans les chapitres précédents va nous permettre de répondre à ces questions.

Les masses expérimentales incluant nécessairement l'effet de la brisure de la symétrie par renversement du temps dans les noyaux impairs, la comparaison entre les différences de masses théoriques et expérimentales requiert la prise en compte de cet effet dans le calcul dès le niveau de champ moyen. Il s'en suit qu'aucune formule de différence de masses ne peut véritablement séparer le gap d'appariement de l'effet de la brisure de symétrie puisque ces deux effets sont engendrés par le même processus physique caractérisé par la création de la qp.

Les résultats obtenus dans les chapitres précédents nous permettent donc d'écrire :

$$\Delta_{HFB}^{(3)}(N) \approx [\Delta + E^{pol}](N) + \frac{(-1)^N}{2} \left. \frac{\partial^2 E^{HFBp}}{\partial N^2} \right|_N \quad (11.1)$$

$$\Delta_{HFB}^{(5)}(N) \approx [\Delta + E^{pol}](N) \quad , \quad (11.2)$$

où, dans le schéma développé, E^{HFBp} est reliée à l'ajout du nucléon et contient l'énergie d'asymétrie, tandis que $[\Delta + E^{pol}](N)$ est associée au blocage de ce nucléon.

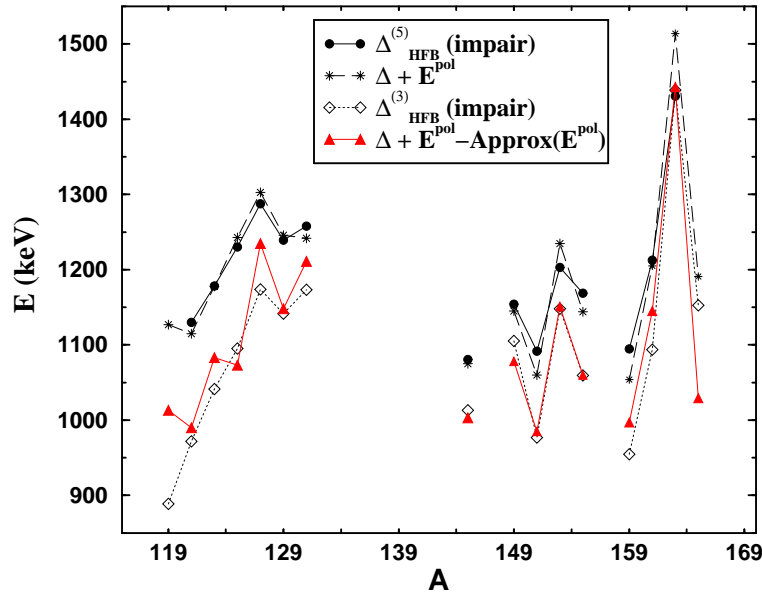


FIG. 11.1 – Comparaison entre $\Delta_{HFB}^{(5)}(impair)$ et l'énergie de qp $[\Delta + E^{pol}]$ le long de la ligne isotopique de cérium. La comparaison entre $\Delta_{HFB}^{(3)}(impair)$ et une approximation du gap auto-cohérent est également donnée.

Bien que cela n'apparaisse pas dans l'écriture précédente, $\Delta^{(5)}(pair)^1$ mélange l'énergie de qp de deux impairs. Cela aboutit à une détérioration de l'identité 11.2 dans les régions où l'énergie de qp varie brutalement comme le montre la Fig. 11.1 pour le ^{163}Ce par exemple. De son côté, $\Delta^{(3)}(impair)$ présente l'avantage de ne contenir qu'une énergie de qp, mais le désavantage d'inclure une contribution supplémentaire comme le montre l'Eq. 11.1.

Il a été montré dans la section 10 que la contribution de E^{HFBp} à $\Delta^{(3)}$ variait entre ± 50 et ± 100 keV dans les isotopes d'étain et entre ± 100 et ± 150 keV dans les noyaux déformés de cérium. En moyenne, cette contribution représente 8 à 12 % des différences de masses. Ensuite, il a été possible de montrer que l'effet de la brisure de l'invariance par renversement du temps était de l'ordre de $+100/150$ keV dans les noyaux de cérium pour la force Sly4. Il découle donc de ces résultats que E^{pol} et la contribution de la partie paire de l'énergie tendent à se compenser dans $\Delta^{(3)}(impair)$, de telle sorte que cette formule de masse est une meilleure mesure de $\Delta(N)$ que $\Delta^{(5)}(pair)$ d'après les Eq. 11.1 et 11.2. Cela est confirmé par la Fig 11.1. Cependant, plusieurs remarques restent à faire.

Tout d'abord, cette compensation valable ici sur l'ensemble de la ligne isotopique peut être un artefact de la région de masse à laquelle nous nous sommes intéressés. En particulier, notre méconnaissance des termes de la fonctionnelle impairs sous renversement du temps rend aléatoire la validité de cet effet et son extrapolation à d'autres régions. Le caractère anti-liant de l'effet de la brisure de l'invariance par renversement du temps n'est pas même assuré aujourd'hui en dépit des résultats présentés ici. Donnons tout de

¹Nous ne considérons pas $\Delta^{(5)}(impair)$ puisque cette formule moyenne les énergies de qp, et donc le gap, de trois noyaux impairs.

même un argument formel en sa faveur : si la même interaction est utilisée dans le canal p-t et dans le canal p-p, les Eq. 7.14 et 7.15 suggère que l'effet de la brisure de symétrie sur l'énergie est répulsif du fait de la nature attractive de l'élément de matrice $\bar{V}_{n\bar{n}n\bar{n}}$ entre états renversés du temps dans le canal d'appariement. Cet argument ne tient pas dans le cadre de la fonctionnelle de la densité.

Ensuite, il est important de comprendre dans quelle mesure le gap d'appariement auto-cohérent $\Delta(N)$ est relié aux éléments de matrice du champ d'appariement. Pour cela, nous rappelons que $\Delta(N)$ traduit à la fois le non-appariement du nucléon célibataire *et* le blocage de l'appariement des autres nucléons provoqués par la création de la qp sur le vide de nombre parité pair pour décrire le fondamental impair. Le calcul perturbatif nous a permis de montrer que :

$$\Delta(N) = \frac{\bar{\Delta}_n + \tilde{\Delta}_n}{2} , \quad (11.3)$$

où n désigne l'état de la base canonique occupé au niveau de Fermi par le nucléon célibataire, $\bar{\Delta}_n$ est l'élément de matrice diagonal du champ d'appariement associé dans l'état impair de nombre parité pair et $\tilde{\Delta}_n$ est l'élément de matrice correspondant dans le vrai impair bloqué.

Dans la littérature, on utilise le plus souvent le gap $\bar{\Delta}_n$ dans les états de nombre parité pair (fondamentaux pair-pair essentiellement). La formule perturbative 7.32 permettant d'établir la relation :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{HFB}[\bar{\rho}] - \mathcal{E}^{HFBp}[\bar{\rho}] &\equiv [\Delta + E^{pol}](N) \\ &= \bar{\Delta}_n - E^{pol}(N) , \end{aligned} \quad (11.4)$$

on constate que, si $\Delta^{(3)}(impair)$ est une bonne mesure du gap $\Delta(N)$ en vertu de l'effet de compensation identifié précédemment, c'est plutôt $\Delta^{(3)}(pair)$ qui est une bonne mesure du gap $\bar{\Delta}_n$.

Au regard de ces derniers éléments, la validité de l'ajustement d'une force d'appariement sur des différences de masses pair-impair dépend directement de la bonne connaissance que nous avons de E^{pol} . En effet, soit cet ajustement consiste à reproduire les différences de masses expérimentales par les gaps HFB $\bar{\Delta}_n$, et l'Eq. 11.4 montre que E^{pol} doit être connu afin de pouvoir faire le bon choix de la formule de masse à utiliser ; soit cet ajustement consiste à reproduire les différences de masses expérimentales par les différences de masses théoriques, et un mauvais traitement de l'effet de la brisure de l'invariance par renversement du temps dans le calcul définira de mauvais gaps $\bar{\Delta}_n$. Un travail important sur la brisure de symétrie par renversement du temps et les termes impairs de la fonctionnelle est donc nécessaire. Une fois cela assuré, le présent travail donne les outils pour une comparaison pertinente entre les formules de différences de masses expérimentales et plusieurs types de quantités théoriques, ainsi que les moyens d'une analyse des différents effets impliqués.

L'étape suivante consistera à reprendre cette analyse dans le cadre des mélanges d'états à 0, 2 et 4 qps permettant d'inclure une partie de l'interaction résiduelle. En effet, s'il

s'avère que ces effets au-delà du champ moyen influence significativement les différences de masses pair-impair, une nouvelle analyse sera nécessaire pour définir, dans ce contexte étendu, ce qui est dû ressort de la structure de nombre parité paire commune aux noyaux pairs et impairs, du non-appariement du nucléon célibataire et de la brisure de l'invariance par renversement du temps. Une telle situation signifierait que l'ajustement de la force d'appariement ne peut se faire de manière rigoureuse au niveau du champ moyen sur les différences de masses expérimentales et que d'autres observables doivent être considérées.

Notons que, tandis que l'analyse au niveau du champ moyen montre bien comment la différence entre la masse d'un noyau pair-pair et celle du voisin n'implique qu'une seule qp, et donc une paire d'élément de matrice du champ d'appariement $(\bar{\Delta}_n, \tilde{\Delta}_n)$, l'utilisation fréquente d'une moyenne pondérée des gaps dans la mer de Fermi d'un noyau pair à comparer aux différences de masses expérimentales [164] évoque plutôt le calcul des masses théoriques dans l'espace des fonctions écrites comme des superpositions d'excitations à 0, 2, 4... qps. Cette méthode de comparaison avec l'expérience revient donc à inclure de manière simple l'effet de l'interaction résiduelle dans le calcul.

Troisième partie

Problème à N corps au-delà du champ moyen.

Dans la première partie de ce mémoire, nous avons justifié l'approximation de champ moyen pour le système nucléaire avant de présenter les méthodes itératives associées. Nous avons également rappelé leur succès quant à la reproduction des propriétés de volume et des observables à un corps sur l'ensemble de la table de masse.

Sans abandonner l'amélioration permanente des calculs de champ moyen, il est nécessaire dans de nombreux cas, pour certains types d'excitations, d'aller au-delà de cette approximation afin d'inclure explicitement des corrélations dans le traitement du système. La façon de le faire dépend des propriétés du noyau à étudier. Nous allons considérer dans la suite deux de ces méthodes, a priori disjointes, dans le but de les réconcilier.

La première, déjà introduite pour justifier l'approximation de champ moyen, concerne les techniques diagrammatiques reposant sur un développement perturbatif de la fonction d'onde et des observables. Dans ce contexte, aller au-delà de l'ordre le plus bas en la matrice G de Brueckner permet d'introduire des corrélations de petite amplitude dans le champ moyen, que celles-ci soient de courte ou de longue portée.

Le second type de méthode est utilisé pour inclure les corrélations associées aux mouvements collectifs de grande amplitude dans le noyau ; celles-ci étant essentielles à la reproduction des propriétés de basse énergie du système. Sont considérés dans ce cadre les différents modes de vibrations de surface (quadrupolaire, octupolaire, triaxial. . .) ainsi que les modes d'énergie nulle associés à la restauration des symétries brisées au niveau du champ moyen (translation, rotation, nombre de particules. . .). Les premiers modes sont étudiés au moyen de la méthode de la coordonnée génératrice (GCM), tandis que les seconds le sont au moyen de la méthode du champ moyen projeté.

Dans ce chapitre, nous rappelons le formalisme variationnel associé à ce second type de méthodes avant de mettre en relief le problème lié à la dépendance en densité du hamiltonien effectif utilisé dans ces calculs. Nous proposons alors une théorie de perturbation étendue permettant à la fois de fonder ces calculs variationnels du point de vue diagrammatique et de dériver les propriétés minimales de la force effective dans ce contexte. Nous dégageons ensuite une prescription pour la dépendance dans les densités locales qui en découle pour les forces phénoménologiques. Pour finir, ces résultats formels sont testés au moyen de calculs explicites portant sur la coexistence de formes dans ^{186}Pb déficient en neutron.

Chapitre 12

Formalisme variationnel.

Les corrélations à inclure nécessitent le traitement simultané des degrés de liberté individuels et collectifs dans un cadre microscopique. Cela se fait à travers un élargissement de l'espace variationnel consistant à utiliser une superposition de fonctions produit $|\Phi^\alpha\rangle$ comme fonction d'essai :

$$\begin{aligned} |\Psi_k\rangle &= \int_{\alpha} F^k(\alpha) |\Phi^\alpha\rangle d\alpha \\ &= \sum_{\alpha} f_{\alpha}^k |\Phi^\alpha\rangle \quad , \end{aligned} \tag{12.1}$$

où la seconde égalité traduit la discrétisation de la coordonnée collective α nécessaire à toute application pratique, tandis que k est un nombre quantique caractérisant les états à N corps obtenus. Cette forme donnée, les états $|\Phi^\alpha\rangle$ et les coefficients f_{α}^k peuvent être optimisés par la minimisation de l'énergie :

$$\mathcal{E}_k^{mel} \equiv \frac{\langle \Psi_k | H | \Psi_k \rangle}{\langle \Psi_k | \Psi_k \rangle} \quad , \tag{12.2}$$

$$= \frac{\sum_{\alpha,\beta} f_{\beta}^{k*} f_{\alpha}^k \langle \Phi^\beta | H | \Phi^\alpha \rangle}{\sum_{\alpha,\beta} f_{\beta}^{k*} f_{\alpha}^k \langle \Phi^\beta | \Phi^\alpha \rangle} \quad . \tag{12.3}$$

L'approximation de champ moyen correspond au cas où un seul coefficient de mélange f_{α}^k est non nul. Nous allons maintenant préciser les cas d'application concrets de cette méthode générale.

12.1 Méthode de la Coordonnée Génératrice.

La méthode de la coordonnée génératrice (GCM) [165, 166, 167] est utilisée pour traiter les mouvements collectifs de basse énergie. Elle permet une description des états excités vibrationnels, que ceux-ci concernent la forme du noyau ou l'appariement, mais aussi

d'introduire les corrélations correspondantes dans l'état fondamental et de calculer les probabilités de transition entre ces états. Cette méthode représente un cas particulier des Eq. 12.1 et 12.3 où les états produit $|\Phi^\alpha\rangle$ sont fixés a priori par des calculs de champ moyen auto-cohérent contraints à différentes valeurs de la coordonnée collective α . Typiquement, la coordonnée collective est choisie comme valeur moyenne dans les états produit du moment quadrupolaire axial ou triaxial, du moment octupolaire, d'un gap d'appariement... le couplage de ces différents modes vibrationnels pouvant être étudié à travers un calcul utilisant des fonctions produits contraintes simultanément sur plusieurs de ces coordonnées collectives. Évidemment, le rapport entre l'intérêt physique du calcul et la lourdeur de celui-ci dépend du bon choix de ces coordonnées collectives pour le système étudié. Les calculs GCM sur des coordonnées collectives liées à la forme du noyau permettent de prendre en compte les états intrus qui jouent un rôle important dans beaucoup de propriétés de structure.

La GCM standard consiste à ne mélanger que les états fondamentaux non-orthogonaux $|\Phi_0^\alpha\rangle$ de champ moyen correspondant à chaque valeur de la coordonnée collective. Il s'agit de l'hypothèse adiabatique où les degrés de liberté individuels sont supposés se réarranger beaucoup plus rapidement que les degrés de liberté collectifs. De rares études ont introduit la non-adiabaticité en incluant des excitations individuelles $|\Phi_i^\alpha\rangle$ dans la fonction d'essai 12.1 [168, 169]. Certains états étant orthogonaux dans ce cas là, la généralisation de la GCM standard nécessite quelques précautions [169]. Dans la présente étude, seuls des calculs réalisés selon l'hypothèse adiabatique seront présentés. Nous dérivons donc les équations dans ce contexte. Notons enfin que seuls les noyaux pair-pair sont traités par la GCM à l'heure actuelle, la brisure de l'invariance par renversement du temps étant très coûteuse à intégrer dans ces calculs. Cela dit, des travaux dans ce sens sont en cours [170].

Les états produit étant fixés a priori, la variation de l'énergie 12.3 se fait par rapport aux coefficients du mélange f_β^k . Cette minimisation se traduit par un problème aux valeurs propres prenant la forme des équations de Hill-Wheeler [165] :

$$\sum_{\alpha} [\mathcal{H}(\beta, \alpha) - \mathcal{E}_k^{mel} \mathcal{I}(\beta, \alpha)] f_{\alpha}^k = 0 \quad , \quad (12.4)$$

où les matrices hamiltonienne \mathcal{H} et de norme \mathcal{I} sont définies par les éléments de matrice :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\beta, \alpha) &= \langle \Phi_0^\beta | H | \Phi_0^\alpha \rangle \quad , \\ \mathcal{I}(\beta, \alpha) &= \langle \Phi_0^\beta | \Phi_0^\alpha \rangle \quad . \end{aligned} \quad (12.5)$$

La matrice de norme $\mathcal{I}(\beta, \alpha)$ est non triviale du fait de la non-orthogonalité de la base dans laquelle le problème aux valeurs propres est écrit. De fait, l'inversion de cette matrice, requise dans la suite, demande certaines précautions sur lesquelles nous reviendrons plus loin. Les différentes valeurs de k (0, 1, 2, ...) désignent les états GCM dans l'ordre croissant de l'énergie. La décomposition de $|\Psi_k\rangle$ en terme d'états produit permet le calcul de l'énergie corrélée, le théorème Wick généralisé [171] rendant possible le calcul de $\mathcal{H}(\beta, \alpha)$ en fonction de la matrice densité et du tenseur d'appariement mixtes :

$$\rho_{ji}^{(\beta,\alpha)} = \frac{\langle \Phi_0^\beta | c_i^\dagger c_j | \Phi_0^\alpha \rangle}{\langle \Phi_0^\beta | \Phi_0^\alpha \rangle} , \quad \kappa_{jl}^{(\beta,\alpha)} = \frac{\langle \Phi_0^\beta | c_l c_j | \Phi_0^\alpha \rangle}{\langle \Phi_0^\beta | \Phi_0^\alpha \rangle} , \quad \kappa_{ik}^{(\beta,\alpha)*} = \frac{\langle \Phi_0^\beta | c_i^\dagger c_k^\dagger | \Phi_0^\alpha \rangle}{\langle \Phi_0^\beta | \Phi_0^\alpha \rangle} . \quad (12.6)$$

Dans la pratique, l'élément de matrice $\mathcal{H}(\beta, \alpha)$ fait usage du Hamiltonien, non pas écrit dans une base $\{c_k\}$ quelconque, mais dans les bases à un corps gauche et droite différentes. Ces bases diagonalisent les champs HF associés au bra et au ket impliqués dans cet élément de matrice. Concrètement, le Hamiltonien prend la forme :

$$H = \sum_{m,n} t_{\beta_m \alpha_n} \beta_m^\dagger \alpha_n + \frac{1}{4} \sum_{m,n,p,q} \bar{V}_{\beta_m \beta_p \alpha_n \alpha_q} \beta_m^\dagger \beta_p^\dagger \alpha_q \alpha_n , \quad (12.7)$$

où les éléments de matrice $\bar{V}_{\beta_m \beta_p \alpha_n \alpha_q}$ sont antisymétrisés. La connaissance de la matrice de passage entre la base $\{\beta_k\}$ et la base $\{\alpha_l\}$ permet alors le calcul explicite des différentes contractions définies dans l'Eq. 12.6 et donc de l'énergie corrélée [26, 172].

Les fonctions f_α^k n'étant pas orthogonales, elles ne peuvent être interprétées comme des fonctions d'onde collectives pour la variable α . On définit un nouvel ensemble de fonctions orthogonales g_β^k reliées aux f_α^k par la relation :

$$g_\beta^k = \sum_{\alpha} \mathcal{I}^{1/2}(\beta, \alpha) f_\alpha^k , \quad (12.8)$$

pour jouer ce rôle. Ainsi, le carré de leur module peut être interprété comme une densité de probabilité relativement à la variable α . Une fois ces fonctions définies, l'élément de matrice de tout opérateur O entre deux états GCM s'écrit sous la forme :

$$\langle \Psi_l | O | \Psi_k \rangle = \sum_{\beta, \alpha} g_\beta^{l*} \tilde{\mathcal{O}}(\beta, \alpha) g_\alpha^k , \quad (12.9)$$

où

$$\tilde{\mathcal{O}}(\beta, \alpha) = \sum_{\gamma, \delta} \mathcal{I}^{-1/2}(\beta, \gamma) \mathcal{O}(\gamma, \delta) \mathcal{I}^{-1/2}(\delta, \alpha) . \quad (12.10)$$

Finalement, les énergies GCM et les fonctions g^k sont les valeurs propres et les vecteurs propres de l'opérateur hermitien $\tilde{\mathcal{H}}$:

$$\sum_{\alpha} \tilde{\mathcal{H}}(\beta, \alpha) g_\alpha^k = \mathcal{E}_k^{mel} g_\beta^k . \quad (12.11)$$

Lorsque les fonctions produits utilisées prennent en compte l'appariement dans le système, celles-ci ne possèdent le bon nombre de neutrons N et de protons Z qu'en moyenne. Un état GCM construit comme superposition linéaire d'états HFB n'aura pas

même ce bon nombre en moyenne. Le nombre moyen de nucléons peut être assuré par l'introduction de deux contraintes dans l'équation de Hill-Wheeler 12.4 mettant en jeu deux paramètres de Lagrange λ_N^k et λ_Z^k , et deux matrices $\Delta\tilde{N}$ et $\Delta\tilde{Z}$ définies de manière analogue à \tilde{H} pour les opérateurs $\Delta N = \hat{N} - N^1$ et $\Delta Z = \hat{Z} - Z$ [172]. Il a été montré dans la Ref. [172] comment la simple utilisation des potentiels chimiques BCS moyennés sur la coordonnée collective α permet d'obtenir les états GCM avec un nombre moyen de particules correct.

12.2 Restauration de symétrie.

Nous avons discuté dans la section 4.1.1 les avantages liés aux brisures de symétries au niveau du champ moyen ainsi que les cas où une restauration de celles-ci est nécessaire. Les modes mous associés aux brisures de symétries correspondent à des mouvements collectifs de grande amplitude particuliers. En ce sens, la restauration des symétries brisées au niveau du champ moyen [173, 174, 175, 104] entre dans le cadre des mélanges de configurations définis par les Eq. 12.1 et 12.3. Ces équations traduisent alors l'utilisation de la dégénérescence des fonctions de champ moyen $|\Phi_0^\alpha\rangle$ brisant une symétrie donnée pour construire une fonction propre du générateur infinitésimal du groupe de symétrie associé.

Nous allons décrire deux cas particuliers de restauration de symétrie : la restauration du bon nombre de particules dans la fonction d'onde et l'obtention d'une fonction propre du moment cinétique J à partir d'une fonction de champ moyen conservant une symétrie axiale. Concernant la restauration du moment angulaire depuis une fonction de champ moyen non axiale ou la restauration de l'invariance par translation, nous renvoyons le lecteur à la Ref. [37].

12.2.1 Projection sur le nombre de particules.

Dans le cas de la projection sur le bon nombre de neutrons, nous rétablissons la symétrie associée à l'invariance du hamiltonien sous les rotations dans l'espace de jauge ; c'est à dire sous les transformations d'un groupe de symétrie à un paramètre. Dans ce cas, le mélange de configuration défini par l'Eq. 12.1 se met sous la forme particulière :

$$|\Psi_N\rangle = \hat{P}_N |\Phi_0^0\rangle \quad , \quad (12.12)$$

où,

$$\hat{P}_N = \frac{1}{2n} \sum_{\alpha=-n}^n e^{i\pi\alpha(\hat{N}-N)/n} \quad , \quad (12.13)$$

¹Nous utilisons de temps en temps la notation \hat{N} pour désigner l'opérateur "nombre de neutrons" afin de le différencier du nombre de neutrons lui-même.

est le projecteur sur l'état propre de \hat{N} de valeur propre N , $|\Phi_0^0\rangle$ est une fonction de champ moyen brisant la symétrie et $2n$ est le nombre d'intervalles utilisés lors de l'intégration sur la variable de jauge. Cette écriture permet de faire le lien avec les notations introduites précédemment en posant :

$$f_\alpha^N = \frac{e^{-i\pi\alpha N/n}}{2n} \quad , \quad (12.14)$$

et

$$|\Phi_0^\alpha\rangle = R(\alpha) |\Phi_0^0\rangle = e^{i\pi\alpha\hat{N}/n} |\Phi_0^0\rangle \quad . \quad (12.15)$$

L'opérateur $R(\alpha)$ parcourt tout le groupe de symétrie associé à l'invariance du hamiltonien à la différence près que α est discret. La nécessité que $|\Psi_N\rangle$ soit un état propre du générateur du groupe de symétrie fixe les coefficients du mélange f_α^N lorsque ce groupe est abélien [40]. En vertu de la commutation de H avec \hat{P}_N et de la propriété $\hat{P}_N^2 = \hat{P}_N$ satisfaite par ce projecteur, l'énergie projetée 12.3 prend la forme :

$$\mathcal{E}_N^{mel} = \frac{\sum_{\alpha=-n}^n e^{-i\pi\alpha N/n} \langle \Phi_0^0 | H e^{i\pi\alpha\hat{N}/n} | \Phi_0^0 \rangle}{\sum_{\alpha=-n}^n e^{-i\pi\alpha N/n} \langle \Phi_0^0 | e^{i\pi\alpha\hat{N}/n} | \Phi_0^0 \rangle} \quad . \quad (12.16)$$

La situation est évidemment similaire pour la projection sur le nombre de protons.

12.2.2 Projection sur le moment angulaire.

Dans le cas de la projection sur le moment cinétique, la situation est compliquée par le fait que le groupe des rotations dans l'espace à trois dimensions n'est pas abélien. Les choses se simplifient malgré tout dès lors que l'on se restreint à la projection d'une fonction produit possédant la symétrie axiale, le long de l'axe z par exemple. Le mélange de configurations décrivant une fonction de moment angulaire I et ayant une projection de ce moment angulaire sur l'axe z égale à M , prend la forme :

$$|\Psi_{IM}\rangle = \hat{P}_{IM} |\Phi_0^0\rangle \quad , \quad (12.17)$$

où, lorsque l'on se restreint également au cas $M = 0$, l'opérateur de projection s'écrit :

$$\hat{P}_{I0} = \frac{2I+1}{2n} \sum_{\beta=-n}^n \sin(\pi\beta/n) d_{00}^{I*}(\pi\beta/n) e^{i\pi\beta J_y/n} \quad , \quad (12.18)$$

$\pi\beta/n$ étant l'angle d'Euler autorisant la rotation autour de l'axe y et $d_{MK}^{I*}(\beta)$ la fonction de Wigner correspondante pour les nombres quantiques (I, M, K) [176]. Cette écriture permet de poser dans le cas qui nous intéresse :

$$f_{\beta}^{I0} = \frac{2I+1}{2n} \sin(\pi\beta/n) d_{00}^{I*}(\pi\beta/n) \quad , \quad (12.19)$$

et

$$|\Phi_0^{\beta}\rangle = R(\beta) |\Phi_0^0\rangle = e^{i\pi\beta J_y/n} |\Phi_0^0\rangle \quad . \quad (12.20)$$

La réduction au cas de la projection d'une fonction possédant la symétrie axiale fixe là encore les coefficients du mélange. L'énergie projetée 12.3 prend finalement la forme :

$$\mathcal{E}_{I0}^{mel} = \frac{\sum_{\beta=-n}^n \sin(\pi\beta/n) d_{00}^{I*}(\pi\beta/n) \langle \Phi_0^0 | H e^{i\pi\beta J_y/n} | \Phi_0^0 \rangle}{\sum_{\alpha=-n}^n \sin(\pi\alpha/n) d_{00}^{I*}(\pi\alpha/n) \langle \Phi_0^0 | e^{i\pi\alpha J_y/n} | \Phi_0^0 \rangle} \quad . \quad (12.21)$$

12.3 Variation avant et après projection.

Dans ces calculs de projection, deux cas doivent être distingués :

- La fonction produit $|\Phi_0^0\rangle$ sur laquelle l'opérateur de projection agit est déterminée par un calcul de champ moyen antérieur à cette projection. On parlera de *Projection Après Variation* (PAV). L'énergie projetée 12.16 ou 12.21 et les autres observables peuvent être calculées directement. Il s'agit en fait d'un cas particulier de la GCM puisque les fonctions de base $|\Phi_0^{\alpha}\rangle$ sont données a priori.
- La fonction produit $|\Phi_0^0\rangle$ est déterminée par minimisation de l'énergie projetée. On parlera de *Variation Après Projection* (VAP). Cette méthode se distingue de la GCM et de la PAV par le fait que la base de fonctions produit est optimisée pour le mélange et non pas au niveau du champ moyen. La VAP est plus satisfaisante du point de vue variationnel mais bien plus lourde à mettre en œuvre numériquement. En ce qui concerne l'énergie totale, la nécessité de la VAP se fait sentir dans les situations de faible brisure de symétrie, au voisinage des fermetures de couche magique par exemple, où la PAV ne peut corriger les faiblesses de la fonction de champ moyen $|\Phi_0^0\rangle$. En ce qui concerne la fonction d'onde elle-même, dont les détails influent fortement sur les probabilités de transition par exemple, le bénéfice de la VAP par rapport à la PAV est plus systématique [177].

12.4 GCM et projection.

L'étape suivante consiste à généraliser le mélange de configuration en associant la GCM à la projection. On procédera ainsi à des calculs GCM en utilisant des états préalablement projetés sur les bons nombres quantiques N , Z et/ou I . Coupler les deux types de mouvements collectifs peut se révéler essentiel dans certains systèmes exotiques présentant par exemple une modification de la structure en couche traditionnelle et des possibilités de coexistence de forme [50, 51, 48, 42, 44].

Les équations dérivées séparément pour la GCM et la projection se généralisent aisément à ce type de mélange [178]. À ce jour, aucun calcul de VAP n'a été mené dans un tel cas de figure.

12.5 Dépendance en densité du hamiltonien.

Nous avons rappelé dans la première partie de ce mémoire comment l'utilisation "naturelle" de la densité locale à un corps scalaire-isoscalaire du champ moyen :

$$\rho_0^\alpha(\vec{R}) = \frac{\langle \Phi_0^\alpha | \hat{\rho}_0(\vec{R}) | \Phi_0^\alpha \rangle}{\langle \Phi_0^\alpha | \Phi_0^\alpha \rangle} , \quad (12.22)$$

dans le canal p-t de l'élément de matrice diagonal $\langle \Phi_0^\alpha | H [\rho(\vec{R})] | \Phi_0^\alpha \rangle$ approxime l'effet de milieu associé à la resommation des corrélations à deux corps dans l'interaction. Cette définition fait usage de la partie locale scalaire-isoscalaire de l'opérateur densité à un corps :

$$\hat{\rho}_0(\vec{r}) = \sum_{k=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_k) = \sum_{I,J,\zeta_z,\zeta'_z,s_z,t} \varphi_I^*(\vec{r}, \zeta'_z, s_z, t) \varphi_J(\vec{r}, \zeta_z, s_z, t) c_{J\zeta_z s_z t}^\dagger c_{I\zeta'_z s_z t} , \quad (12.23)$$

où les $\{\varphi_{I=N\pi}(\vec{r}, \zeta_z, s_z, t)\}$ constitue une base à un corps propre pour la projection du spin sur l'axe z .

Concernant le calcul de l'énergie associée aux mélanges de configurations discutés dans la présente partie, le choix de densité n'est ni justifié par une théorie de perturbation, ni même naturel. En effet, une telle énergie s'exprime en fonction d'éléments de matrice de H entre états produit différents pour lesquels le choix de la densité à utiliser dans le vertex effectif n'est pas bien défini et ne peut-être suggéré par la théorie de Goldstone-Brueckner standard.

Sans être justifiées par aucun argument théorique fort, deux prescriptions, vérifiant un certain nombre de propriétés minimales sur lesquelles nous reviendrons par la suite, ont été utilisées jusqu'à ce jour dans les calculs de mélanges de configurations.

(1) La densité *mixte* locale :

$$\rho_0^{(\beta,\alpha)}(\vec{R}) = \frac{\langle \Phi_0^\beta | \hat{\rho}_0(\vec{R}) | \Phi_0^\alpha \rangle}{\langle \Phi_0^\beta | \Phi_0^\alpha \rangle} , \quad (12.24)$$

qui doit être insérée dans l'élément de matrice $\mathcal{H}(\beta, \alpha)$ de l'Eq. 12.3. Ce choix a été fait dans de nombreux calculs de GCM avec ou sans projection sur le nombre de particules ou le moment angulaire [26, 178, 179, 172, 180, 181, 44]. Notons que la partie diagonale de la densité mixte est égale à la densité de champ moyen : $\rho_0^{(\alpha,\alpha)}(\vec{R}) = \rho_0^\alpha(\vec{R})$.

Ce choix repose sur l'interprétation de la dépendance en densité comme provenant de la renormalisation de forces à trois corps absentes dans le hamiltonien. En effet, l'équivalence entre une force à trois corps de portée nulle et une force à deux corps de portée nulle dépendant linéairement de la densité dans le cas d'un système saturé en spin a été montré au niveau du champ moyen [182]. Sans avoir démontré la même équivalence au-delà du champ moyen, l'utilisation de la densité mixte dans le vertex effectif à deux corps a été suggérée en raison de l'écriture possible de l'élément de matrice non-diagonal $\mathcal{H}(\beta, \alpha)$ en terme des seules matrice densité et tenseur d'appariement mixtes lorsqu'une force à trois corps est utilisée.

(2) La densité *corrélée* locale :

$$\rho_0^{\Psi_k}(\vec{R}) = \frac{\langle \Psi_k | \hat{\rho}_0(\vec{R}) | \Psi_k \rangle}{\langle \Psi_k | \Psi_k \rangle}, \quad (12.25)$$

qui ne dépend pas de (β, α) . Elle est donc insérée dans tous les éléments de matrice $\mathcal{H}(\beta, \alpha)$ impliqués dans l'expression de l'énergie corrélée. Ce choix a été fait dans des calculs de projection exacte et approchée sur le nombre de particules [25, 183, 184, 44] où la similitude des résultats avec ceux obtenus en usant de la densité mixte a été identifiée.

Nous pourrions ajouter à ces deux choix l'éventualité d'utiliser la densité locale de *champ moyen* dans les calculs de projection associés à un groupe abélien. Il est en effet possible dans ce cas d'exprimer l'énergie corrélée en fonction des seules matrice densité et tenseur d'appariement du champ moyen que l'on projette [104], ce qui suggère que l'énergie reste une fonctionnelle de ces seules variables lorsqu'un hamiltonien dépendant de la densité est utilisé. Aucun calcul quantitatif faisant usage de cette prescription n'a été réalisé à ce jour. On note que cet argument ne tient plus pour un mélange de configurations quelconque puisque la densité d'énergie corrélée n'est en général pas exprimable en termes d'une seule matrice densité et d'un seul tenseur d'appariement de champ moyen.

Le choix de ces densités n'étant motivé que par des arguments de bon sens, il apparait essentiel d'en fonder un sur des bases théoriques plus solides. Nous insistons dès à présent sur le fait qu'une réponse commune doit être trouvée pour la projection et la GCM à partir du moment où ces méthodes appartiennent au même cadre théorique. Dans ce but, il est d'abord nécessaire de revenir aux origines possibles de la dépendance en densité de la force effective v .

12.6 Origines de la dépendance en densité du potentiel.

Il est possible d'en identifier trois [80, 76] :

- (1) L'interaction effective inclut des corrélations induites par la force nue à travers une resommation explicite de diagrammes dont l'effet dépend de la densité dans le

système. Tel est le cas des corrélations à deux corps associées au cœur dur de l'interaction et à la force tenseur resommées par la matrice G de Brueckner (cf. section 3.2). En ce sens, nous avons rappelé que les forces phénoménologiques peuvent être interprétées comme des matrices G à l'approximation de densité locale [66, 67, 68, 98]. D'autres corrélations telles que celles à trois corps, quatre corps... ne sont pas incorporées dans la matrice G . Celles-ci doivent donc être considérées explicitement. Si tel n'est pas le cas, on peut également imaginer de les renormaliser phénoménologiquement à travers une dépendance en densité supplémentaire dans la force utilisée à l'ordre le plus bas des perturbations [80]. Cette démarche rend difficile l'utilisation ultérieure d'un développement perturbatif pour inclure d'autres corrélations.

- (2) La force phénoménologique omet explicitement certaines structures opératoriels connues pour jouer un rôle important dans le processus de saturation de la matière nucléaire. Tel est le cas de la force tenseur qui n'apparaît pas dans les interactions de Skyrme et de Gogny. Dans une telle situation, la force effective renormalise nécessairement son influence par une dépendance phénoménologique dans la densité [185].
- (3) Le hamiltonien néglige les forces à plus de deux corps. L'importance de la force à trois corps rappelée dans l'introduction nécessite une certaine compensation si celle-ci n'est pas prise en compte explicitement.

La renormalisation de ces effets est plus ou moins bien comprise et incorporée dans la définition des forces phénoménologiques utilisées au niveau du champ moyen. En revanche, cette renormalisation n'est pas du tout comprise dans le cas des calculs impliquant un mélange d'états produit non-orthogonaux, comme cela a été discuté précédemment. La modification correspondante de l'espace variationnel traduit le traitement explicite de degrés de liberté collectifs par rapport auxquels l'interaction effective n'a pas été définie.

La dérivation de la formule analytique pour la dépendance en densité issue de chacun des points précédents est hors d'atteinte, même au niveau du champ moyen. L'objectif consiste donc à déterminer le *type* de densité locale à utiliser dans les calculs de mélange de configurations avant d'inclure de la phénoménologie. Nous commençons par nous pencher sur la resommation des corrélations à deux corps engendrées par la force nue, avant de poursuivre l'étude par la renormalisation des effets liés aux forces à plus de deux corps.

Chapitre 13

Théorie de perturbation étendue.

Au vu des sections précédentes, les raisons du développement d’une nouvelle théorie de perturbation sont au nombre de deux : donner une assise perturbative aux calculs de GCM et de projection et déterminer dans le même temps les propriétés de la force effective renormalisant les corrélations à deux corps dans ce contexte.

Tandis que les formules perturbatives de Goldstone-Brueckner sont écrites par rapport à un seul champ moyen de référence, nous allons maintenant considérer un développement fondé sur un ensemble de champs moyens non-orthogonaux. Une idée naturelle est de faire évoluer la combinaison linéaire définie par l’Eq. 12.1 de $t = -\infty$ à $t = 0$. Afin de pouvoir écrire le vrai fondamental comme l’évolué de cet état, il faut trouver un hamiltonien à un corps h_0^{mel} dont l’état fondamental est le mélange de configuration 12.1, puis définir un hamiltonien auxiliaire de la forme :

$$H(\epsilon, t) = h_0^{mel} + \exp(-\epsilon|t|) (H - h_0^{mel}) \quad , \quad (13.1)$$

afin de dériver une formule de Gell-Man-Low étendue. Cependant, il n’est pas possible de trouver un tel opérateur h_0^{mel} pour un mélange de configurations quelconque. Afin de contourner cette difficulté, nous proposons une approche différente, fondée sur l’arbitraire quant au choix du hamiltonien non-perturbé h_0^α dans la théorie de Goldstone-Brueckner. Cet arbitraire, utilisé dans la théorie standard pour optimiser l’état non-perturbé à travers la “meilleure” définition possible du potentiel Γ^α , est mis à profit ici pour superposer l’expression du vrai fondamental obtenu selon la procédure de Brueckner-Goldstone à partir d’un ensemble de déterminants de Slater $|\Phi_0^\alpha\rangle$ différents.

Soit un ensemble de champs moyens, interactions résiduelles, états fondamentaux non-dégénérés et états excités associés $\{h_0^\alpha, h_1^\alpha, |\Phi_0^\alpha\rangle, |\Phi_i^\alpha\rangle\}$. Il s’agit par exemple des opérateurs à un corps h_0^α correspondant à différentes orientations intrinsèques d’un même champ moyen déformé. En choisissant la déformation selon un processus de minimisation de l’énergie (B)HF correspondante, chacun des h_0^α possède une densité d’états minimale au niveau de Fermi se traduisant par l’existence d’un coût énergétique non-nul pour toute excitation p-t. Cela assure la non-dégénérescence des états fondamentaux $|\Phi_0^\alpha\rangle$ pour chaque α . Un second cas consiste à définir l’ensemble des h_0^α à partir de calculs de champ moyen contraint pour différentes valeurs d’une coordonnée collective α . Dans ce cas, des croisements de niveaux peuvent se produire au niveau de Fermi pour certaines

valeurs de la contrainte, rendant le fondamental de h_0^α dégénéré. Il faut alors choisir un ensemble discret de valeurs de la coordonnée collective le long du chemin de contrainte pour lesquelles cela ne se produit pas.

L'idée est donc de faire évoluer chacun des vides $|\Phi_0^\alpha\rangle$ de $t = -\infty$ à $t = 0$ selon le schéma développé dans la section 3.2. La normalisation $\langle \Phi_0^\alpha | \Theta_0^\alpha \rangle = 1$ pour chaque α permet d'éliminer les diagrammes vide/vide disconnectés. Ainsi, les états $|\Theta_0^\alpha\rangle$ ne diffèrent les uns des autres que par leur norme. Ensuite, la sommation des échelles de Brueckner est réalisée pour chaque α de telle sorte que les états $|\Theta_0^\alpha\rangle$ prennent la forme donnée par l'Eq. 3.18. Enfin, une combinaison linéaire arbitraire de ces états est effectuée pour obtenir la fonction du vrai état fondamental du système sous la forme :

$$|\Theta_0\rangle = \sum_{\alpha} f_{\alpha} |\Theta_0^\alpha\rangle \quad , \quad (13.2)$$

$$= \sum_{\alpha} f_{\alpha} \sum_{n_{\alpha}} \left(\frac{1}{\mathcal{E}_0^\alpha - h_0^\alpha} G_1^\alpha \right)^{n_{\alpha}} |\Phi_0^\alpha\rangle_{\text{Lié/Irré.}} \quad . \quad (13.3)$$

Chaque état $|\Theta_0^\alpha\rangle$ étant le vrai état fondamental de H avec la valeur propre E_0 , l'état $|\Theta_0\rangle$ le sera également, et cela quels que soient les coefficients f_{α} . En fait, seule la normalisation change entre l'Eq. 3.9 et l'Eq. 13.3. Nous nous concentrons à présent sur le développement perturbatif de l'énergie tandis que le choix optimal des coefficients f_{α} sera discuté dans la section 13.5.

13.1 Développement de l'énergie.

Comme cela a été rappelé dans la section 3.2, l'expression perturbative usuelle de l'énergie repose sur le développement de la correction $\Delta\mathcal{E}_0^\alpha$ à l'énergie de champ moyen \mathcal{E}_0^α . Elle est obtenue en prenant le produit scalaire de $h_1^\alpha |\Theta_0^\alpha\rangle$ avec le bra non-perturbé $\langle \Phi_0^\alpha |$. Dans notre nouvelle approche, il n'existe pas d'état et d'énergie non perturbés de référence (excepté le cas trivial où un seul des f_{α} est non nul). Par conséquent, nous conservons la symétrie entre le bra et le ket en exprimant l'énergie totale E_0 comme la valeur moyenne de H dans l'état fondamental $|\Theta_0\rangle$. Utilisant l'Eq. 13.3, nous obtenons :

$$\langle \Theta_0 | H | \Theta_0 \rangle = E_0 \langle \Theta_0 | \Theta_0 \rangle \quad (13.4)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{\alpha, \beta, n_{\alpha}, n_{\beta}} f_{\beta}^* f_{\alpha} \langle \Phi_0^\beta | \left(G_1^\beta \frac{1}{\mathcal{E}_0^\beta - h_0^\beta} \right)^{n_{\beta}} [t \\ &\quad + V] \left(\frac{1}{\mathcal{E}_0^\alpha - h_0^\alpha} G_1^\alpha \right)^{n_{\alpha}} |\Phi_0^\alpha\rangle_{\text{Lié/Irré.}} \quad , \end{aligned} \quad (13.5)$$

où la norme s'écrit

$$\langle \Theta_0 | \Theta_0 \rangle = \sum_{\alpha, \beta, n_\alpha, n_\beta} f_\beta^* f_\alpha \langle \Phi_0^\beta | \left(G_1^\beta \frac{1}{\mathcal{E}_0^\beta - h_0^\beta} \right)^{n_\beta} \left(\frac{1}{\mathcal{E}_0^\alpha - h_0^\alpha} G_1^\alpha \right)^{n_\alpha} | \Phi_0^\alpha \rangle_{\text{Lié/Irréd.}} \quad (13.6)$$

Les diagrammes de Goldstone associés aux développements 13.5 et 13.6 sont irréductibles par rapport aux matrices de Brueckner G^β et G^α . Notons que la dépendance dans les énergies W_β et W_α n'apparaît pas pour alléger l'écriture.

Dans les équations qui viennent d'être dérivées, le développement s'écrit comme une somme sur (α, β) de diagrammes $\langle \Phi_0^\beta | \dots | \Phi_0^\alpha \rangle$ impliquant un vide d'arrivée éventuellement différent de celui de départ. Plus précisément, la somme porte sur k^2 termes si k vides $|\Phi_0^\alpha\rangle$ sont choisis initialement. Considérons un couple (α, β) et donnons les règles permettant de calculer et comprendre les diagrammes apparaissant dans ce nouveau développement.

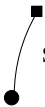
Tout d'abord, les opérateurs ayant un indice β dans les Eq. 13.5 et 13.6 sont définis dans la base à une particule $\{\beta_k\}$ diagonalisant le champ moyen h_0^β . Les états de cette base sont associés aux lignes tiretées dans les diagrammes. De la même manière, les opérateurs indicés α sont écrits dans la base à un corps $\{\alpha_l\}$; les états de cette base étant associés aux lignes pleines dans les diagrammes. Pour des raisons de symétrie et de simplicité de calcul, le hamiltonien apparaissant au milieu de l'Eq. 13.5 est écrit dans les bases gauche et droite $\{\beta_k\}$ et $\{\alpha_l\}$. Cela correspond à la forme donnée par l'Eq. 12.7.

Ensuite, un ensemble complet d'états d'excitation à np-nt doit être inséré entre chaque couple d'opérateurs en ne conservant que les diagrammes liés. Il s'agit d'excitations p-t par rapport au vide $|\Phi_0^\alpha\rangle$ pour les opérateurs indicés α et par rapport au vide $|\Phi_0^\beta\rangle$ pour les opérateurs indicés β . Ces diagrammes nécessitent la définition de plusieurs types de propagateurs. Quelques exemples ainsi que des définitions utiles à la compréhension des diagrammes sont donnés sur la Fig 13.1. Lisant la formule 13.5 de droite à gauche, ce qui est équivalent à lire les diagrammes de Goldstone de bas en haut, on peut se convaincre que les nucléons vont d'abord se propager du vide $|\Phi_0^\alpha\rangle$ au même vide $|\Phi_0^\alpha\rangle$ dans des états individuels ϕ_{α_k} . Ensuite, des propagateurs impliquant deux vides différents et/ou des états individuels différents vont apparaître au passage de H en raison du jeu d'excitations p-t se référant au vide $|\Phi_0^\alpha\rangle$ inséré sur sa droite et de celui se référant au vide $|\Phi_0^\beta\rangle$ inséré sur sa gauche. Pour finir, les nucléons se propageront du vide $|\Phi_0^\beta\rangle$ au même vide $|\Phi_0^\beta\rangle$ dans des états individuels ϕ_{β_k} . Graphiquement, nous avons choisis de spécifier les vides impliqués dans une contraction en attachant un carré pour $|\Phi_0^\beta\rangle$ et un rond pour $|\Phi_0^\alpha\rangle$ aux extrémités du propagateur (cf. Fig. 13.1). À l'exception de la définition de ces propagateurs et de la présence de deux types d'états à un corps, les règles de calcul sont identiques à celles définies dans la Ref. [61] pour calculer les diagrammes de Goldstone standards. Notons pour finir que la non-orthogonalité des excitations p-t construites sur les vides $|\Phi_0^\alpha\rangle$ et $|\Phi_0^\beta\rangle$ rend le nombre de diagrammes non-nuls plus important qu'à l'accoutumée.

13.2 Interaction effective.

À présent, il reste à traiter les divergences induites par l'interaction nue issue de

Conventions

Trait plein \longrightarrow et indice α \longleftrightarrow se rapportent au ket non-perturbé
 Trait hachure \dashrightarrow et indice β \longleftrightarrow se rapportent au bra non-perturbé
 ● et ■ dans  signifient que les nucléons se propagent de $|\phi_0^\alpha\rangle$ vers $\langle\phi_0^\beta|$ respectivement

Les propagateurs non-nuls sont typiquement de la forme (dessins avec deux flèches)

$$\begin{aligned}
 & \begin{array}{c} \text{■} \\ \text{●} \end{array} \longleftrightarrow \frac{\langle\phi_0^\beta|\beta_p^+|\phi_0^\alpha\rangle}{\langle\phi_0^\beta|\phi_0^\alpha\rangle} = \begin{array}{c} \text{■} \\ \text{■} \end{array} = \delta_{pp}, \quad , \quad \begin{array}{c} \text{■} \\ \text{●} \end{array} \longleftrightarrow \frac{\langle\phi_0^\beta|\beta_t^+|\phi_0^\alpha\rangle}{\langle\phi_0^\beta|\phi_0^\alpha\rangle}, \\
 & \begin{array}{c} \text{●} \\ \text{●} \end{array} \longleftrightarrow \frac{\langle\phi_0^\alpha|\alpha_t^+|\phi_0^\alpha\rangle}{\langle\phi_0^\alpha|\phi_0^\alpha\rangle}, \quad , \quad \begin{array}{c} \text{■} \\ \text{■} \end{array} \longleftrightarrow \frac{\langle\phi_0^\beta|\alpha_p^+|\phi_0^\alpha\rangle}{\langle\phi_0^\beta|\phi_0^\alpha\rangle} = \rho_{\alpha_t \alpha_p}^{(\beta,\alpha)} \dots
 \end{aligned}$$

FIG. 13.1 – Définitions de différents éléments impliqués dans les diagrammes issus du développement de l'énergie 13.5. Quelques exemples de propagateurs sont donnés.

l'opérateur hamiltonien H dans la formule 13.5. Cette divergence a été séparée de celles liées à l'évolution temporelle de la fonction d'onde dont le traitement a été réalisé par la sommation des échelles de Brueckner dans chaque composante de l'état $|\Theta_0\rangle$. Cela semble satisfaisant puisque ces dernières ne sont pas liées au calcul de la valeur moyenne de tel ou tel opérateur.

Dans l'Eq. 13.5, chaque diagramme impliquant une interaction V peut être groupé avec les diagrammes ne différant de celui-ci que par l'apparition d'une matrice G^α juste avant l'interaction V , et connectée à elle par l'intermédiaire de deux états de particule dans la base $\{\alpha\}$, et/ou par l'apparition d'une matrice G^β juste après V et connectée à elle par l'intermédiaire de deux états de particule dans la base $\{\beta\}$. Ce groupement de diagrammes est équivalent au remplacement de l'interaction V par une matrice de réaction $G^{(\beta,\alpha)}$ sommant des échelles de Brueckner *généralisées* dans lesquelles les nucléons se propagent dans les deux bases à un corps associées aux deux vides non-orthogonaux impliqués. De cette manière, tous les diagrammes correspondant à l'Eq. 13.5 sont engendrés. Chacun d'entre eux s'exprime en fonction de $G^{(\beta,\alpha)}$ qui ne présente plus de singularité comme cela sera montré dans la section suivante. Le contenu diagrammatique de la matrice $G^{(\beta,\alpha)}$ est illustré sur la Fig. 13.2, tandis que son expression analytique en fonction des deux matrices de Brueckner standard G^α et G^β est :

$$\begin{aligned}
 G^{(\beta,\alpha)}(W_\beta, W_\alpha) &= V + G^\beta(W_\beta) \frac{Q^\beta}{W_\beta - h_0^\beta} V \\
 &\quad + V \frac{Q^\alpha}{W_\alpha - h_0^\alpha} G^\alpha(W_\alpha) \\
 &\quad + G^\beta(W_\beta) \frac{Q^\beta}{W_\beta - h_0^\beta} V \frac{Q^\alpha}{W_\alpha - h_0^\alpha} G^\alpha(W_\alpha) \quad .
 \end{aligned}
 \tag{13.7}$$

Les éléments de matrice de $G^{(\beta,\alpha)}$ ainsi que les définitions précises de W_β and W_α sont donnés dans l'annexe H. L'interaction $G^{(\beta,\alpha)}$ satisfait également à une équation auto-cohérente donnée dans cette même annexe. Le développement de l'énergie peut être réécrit en fonction de $G^{(\beta,\alpha)}$ et l'Eq. 13.5 prend la forme :

$$\begin{aligned}
 \langle \Theta_0 | H | \Theta_0 \rangle &= \sum_{\alpha, \beta, n_\alpha, n_\beta} f_\beta^* f_\alpha \langle \Phi_0^\beta | \left(G_1^\beta \frac{1}{\mathcal{E}_0^\beta - h_0^\beta} \right)^{n_\beta} [t \\
 &\quad + G^{(\beta,\alpha)}] \left(\frac{1}{\mathcal{E}_0^\alpha - h_0^\alpha} G_1^\alpha \right)^{n_\alpha} | \Phi_0^\alpha \rangle_{\text{Lié/Irréd.}} ,
 \end{aligned}
 \tag{13.8}$$

où les diagrammes liant G^α à $G^{(\beta,\alpha)}$ par deux états de particule relativement à la base $\{\alpha_k\}$ et/ou $G^{(\beta,\alpha)}$ à G^β par deux états de particule relativement à la base $\{\beta_k\}$ sont exclus sous peine de double-comptage.

La matrice de réaction $G^{(\beta,\alpha)}$ est donc l'interaction effective resolvant le problème du cœur dur dans ce nouveau cadre perturbatif. Une propriété remarquable de cette

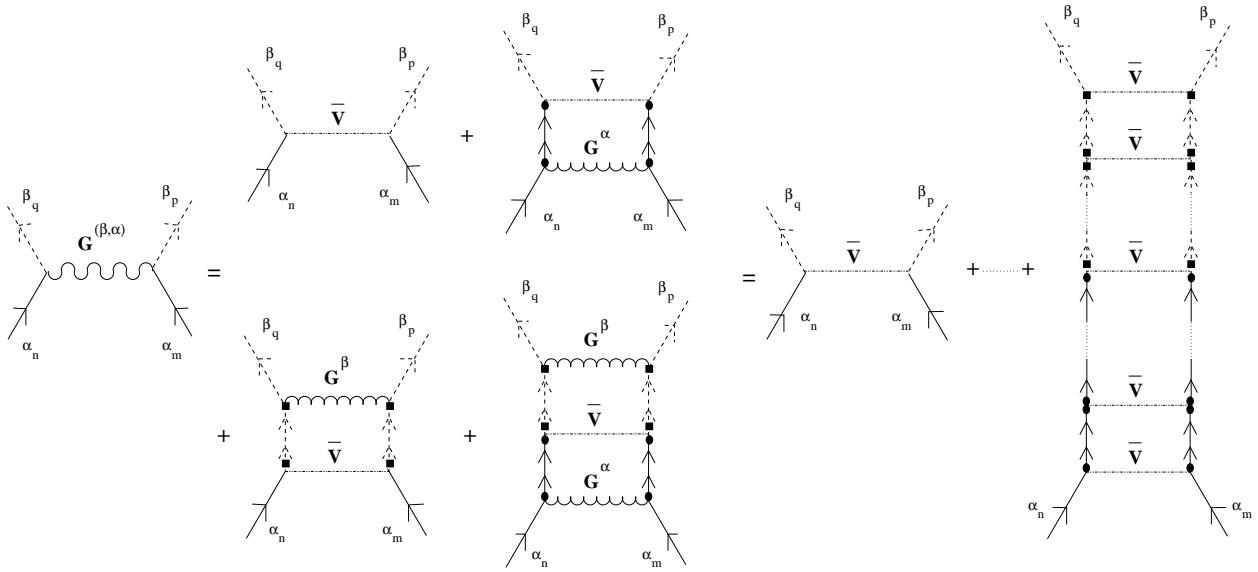


FIG. 13.2 – Représentation diagrammatique de la matrice $G^{(\beta, \alpha)}$ sommant les échelles de Brueckner généralisées.

interaction effective est sa dépendance dans l'élément de matrice $\langle \Phi_0^\beta | \dots | \Phi_0^\alpha \rangle$ dans lequel elle intervient. Ainsi, lorsque k états produit sont utilisés dans la superposition définie par l'Eq. 13.2, le schéma développé requiert le calcul de k matrices G^α et de k^2 matrices $G^{(\beta, \alpha)}$. Cela semble prohibitif quant à la réalisation de calculs quantitatifs.

Son but premier étant de renormaliser le cœur dur, la matrice de Brueckner ne devrait pas être très sensible à la base à un corps utilisée pour le faire et toutes les matrices G^α devraient être relativement semblables. Cependant, des calculs BHF ont montré que cela ne constitue pas une approximation satisfaisante (cf. Ref. [186] par exemple). Nous n'étudierons pas plus avant les approximations nécessaires à la réalisation de calculs perturbatifs quantitatifs puisque ce schéma ne sera utilisé que sur le plan formel dans ce travail.

13.3 Fonction d'onde de paire et propriétés de la force effective.

Nous avons rappelé comment les propriétés de la matrice G^α sont illustrées à travers celles de la fonction d'onde corrélée à deux particules définie par :

$$|\psi_{pq}^\alpha(W_\alpha)\rangle = |\alpha_p \alpha_q\rangle + \frac{Q^\alpha}{W_\alpha - h_0^\alpha} V |\psi_{pq}^\alpha(W_\alpha)\rangle . \quad (13.9)$$

Celle-ci s'annulant rapidement pour une distance relative de l'ordre du cœur répulsif de l'interaction, l'élément de matrice

$$\langle \alpha_r \alpha_s | G^\alpha(W_\alpha) | \alpha_p \alpha_q \rangle = \langle \alpha_r \alpha_s | V | \psi_{pq}^\alpha(W_\alpha) \rangle , \quad (13.10)$$

ne présente aucune pathologie contrairement à $\langle \alpha_r \alpha_s | V | \alpha_p \alpha_q \rangle$.

De la même manière, nous nous intéressons à l'élément de matrice $\langle \beta_r \beta_s | G^{(\beta, \alpha)} | \alpha_p \alpha_q \rangle$ afin de dégager les caractéristiques de la matrice $G^{(\beta, \alpha)}$. En utilisant l'Eq. 13.7, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
 \langle \beta_r \beta_s | G^{(\beta, \alpha)} | \alpha_p \alpha_q \rangle &= \langle \beta_r \beta_s | V | \alpha_p \alpha_q \rangle \\
 &+ \langle \psi_{rs}^\beta | V \frac{Q^\beta}{W_\beta - h_0^\beta} V | \alpha_p \alpha_q \rangle \\
 &+ \langle \beta_r \beta_s | V \frac{Q^\alpha}{W_\alpha - h_0^\alpha} V | \psi_{pq}^\alpha \rangle \\
 &+ \langle \psi_{rs}^\beta | V \frac{Q^\beta}{W_\beta - h_0^\beta} V \frac{Q^\alpha}{W_\alpha - h_0^\alpha} V | \psi_{pq}^\alpha \rangle.
 \end{aligned} \tag{13.11}$$

Utilisant l'Eq. 13.9, les termes du membre de droite de l'Eq. 13.11 se combinent de façon à obtenir :

$$\langle \beta_r \beta_s | G^{(\beta, \alpha)}(W_\alpha, W_\beta) | \alpha_p \alpha_q \rangle = \langle \psi_{rs}^\beta(W_\beta) | V | \psi_{pq}^\alpha(W_\alpha) \rangle. \tag{13.12}$$

Cette identité montre que $G^{(\beta, \alpha)}$ renormalise les corrélations à deux corps liées au cœur dur de l'interaction nue de telle sorte que ses éléments de matrice à deux corps ont de bonnes propriétés. Ainsi, le développement de l'énergie 13.8 ne souffre plus de la présence de diagrammes divergents. Comparant les Eq. 13.12 et 3.17, on constate que la matrice $G^{(\beta, \alpha)}$ renormalise plus de corrélations que la matrice de Brueckner standard puisqu'elle corrèle à la fois le ket et le bra dans l'élément de matrice à deux corps.

Etant données les règles de calcul et la définition des interactions G^α , G^β et $G^{(\beta, \alpha)}$, l'Eq. 13.8 complétée de celle pour la norme fournit un développement cohérent de l'énergie de l'état fondamental du système. Les exposants n_β, n_α qui définissent l'ordre du développement pour chaque élément de matrice $\langle \Phi_0^\beta | \dots | \Phi_0^\alpha \rangle$ sont pris partout identiques $n_\alpha = n_\beta = n$. Cette stratégie consiste à conserver les mêmes diagrammes relativement à tous les états produit $|\Phi_0^\alpha\rangle$ impliqués, et cela pour le ket comme pour le bra dans le calcul de $\langle \Theta_0 | H | \Theta_0 \rangle$. Enfin, l'ordre dans les matrices G^α et G^β doit être le même pour $\langle \Theta_0 | H | \Theta_0 \rangle$ et $\langle \Theta_0 | \Theta_0 \rangle$.

13.4 Approximation à l'ordre le plus bas.

Considérons l'ordre le plus bas du développement de l'énergie dérivé dans la section précédente. Cela revient à ne garder que le terme $n = 0$ dans les Eq. 13.6 et 13.8. L'énergie approchée de l'état fondamental devient :

$$\left(\mathbf{E}_0 \left\langle \theta \mid \theta \right\rangle \right)^{(n=0)} = \sum_{\alpha, \beta} \mathbf{f}_\beta^* \mathbf{f}_\alpha \left(\text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} \right)$$

FIG. 13.3 – Approximation à l'ordre le plus bas pour l'énergie.

$$\begin{aligned}
 E_0^{n=0} &= \frac{\sum_{\alpha, \beta} f_\beta^* f_\alpha \langle \Phi_0^\beta | t + G^{(\beta, \alpha)}(0, 0) | \Phi_0^\alpha \rangle}{\sum_{\alpha, \beta} f_\beta^* f_\alpha \langle \Phi_0^\beta | \Phi_0^\alpha \rangle} \\
 &= \frac{\sum_{\alpha, \beta} f_\beta^* f_\alpha \left[\sum_{\beta_m \alpha_n} t_{\beta_m \alpha_n} \rho_{\alpha_n \beta_m}^{(\beta, \alpha)} \right.}{\sum_{\alpha, \beta} f_\beta^* f_\alpha \langle \Phi_0^\beta | \Phi_0^\alpha \rangle} \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{\beta_m \beta_p \alpha_n \alpha_q} G_{\beta_m \beta_p \alpha_n \alpha_q}^{(\beta, \alpha)}(0, 0) \rho_{\alpha_n \beta_m}^{(\beta, \alpha)} \rho_{\alpha_q \beta_p}^{(\beta, \alpha)} \right] \langle \Phi_0^\beta | \Phi_0^\alpha \rangle}{\sum_{\alpha, \beta} f_\beta^* f_\alpha \langle \Phi_0^\beta | \Phi_0^\alpha \rangle} .
 \end{aligned} \tag{13.13}$$

Cette expression est formellement identique à l'Eq. 12.3 à cela près que l'interaction à deux corps V a été remplacée par la matrice $G^{(\beta, \alpha)}$ sur l'échelle d'énergie ($W_\alpha = W_\beta = 0$). Par conséquent, notre objectif de donner une assise perturbative aux calculs de mélange de configuration de type GCM ou projection, tout en définissant l'interaction effective appropriée, est atteint. L'écriture diagrammatique correspondant à l'Eq. 13.13 est donnée sur la Fig. 13.3.

Notons que l'ordre le plus bas contient les corrélations de basse énergie associées au mélange d'états produit non-orthogonaux. Cela suggère que la théorie de perturbation développée ici est adaptée aux systèmes mous vis à vis d'un degré de liberté collectif. Dans ce langage, l'ordre le plus bas correspond à une approximation adiabatique de type Born-Oppenheimer qui sera de bonne qualité si les degrés de liberté individuels relaxent beaucoup plus rapidement que ne le font les degrés collectifs. Aller aux ordres supérieurs reviendra à introduire des effets diabatiques.

Comme nous l'avons vu, la matrice $G^{(\beta, \alpha)}$ dépend de l'élément de matrice $\langle \Phi_0^\beta | \dots | \Phi_0^\alpha \rangle$ dans lequel elle intervient. Ainsi, l'énergie à l'ordre le plus bas ne peut se factoriser sous la forme donnée par l'Eq. 12.2 obtenue comme la valeur moyenne d'un hamiltonien dans un état $|\Psi_k\rangle$ bien défini. Du fait de l'analogie existant entre l'énergie variationnelle 12.3 et l'énergie perturbative 13.13 renormalisant les corrélations à deux corps, on définira malgré tout l'état $|\Psi_k\rangle$ comme étant l'état approché correspondant à partir duquel les autres observables seront calculées en utilisant des opérateurs nus. Ce procédé fournira une approximation des observables de même qualité que pour l'énergie à condition que les corrélations associées à la resommation des échelles soient faibles pour les opérateurs en question. On retrouve précisément la situation rencontrée dans les calculs de GCM ou de projection réalisés jusqu'à ce jour au moyen d'un hamiltonien dépendant de la densité [25, 26, 44, 167, 172, 178, 179, 180, 181, 184]. En effet, tandis que l'énergie correspondante ne saurait être écrite comme la valeur moyenne d'un hamiltonien nu dans un état bien

défini, l'état $|\Psi_k\rangle$ est utilisé avec d'autres opérateurs nus pour calculer des observables telles que les probabilités de transition.

Le fait qu'il n'existe pas d'état approché correspondant à l'énergie 13.13 est dû à la sommation des échelles dans $G^{(\beta,\alpha)}$ à laquelle ne correspond pas d'ordre bien défini dans le développement de $|\Theta_0\rangle$. Bien que cela soit plus subtile dans le cas de l'approximation de BHF standard du fait de la factorisation de l'énergie en un seul élément de matrice, l'utilisation du déterminant de Slater $|\Phi_0^\alpha\rangle$ comme fonction du système est en fait du même ordre d'approximation que celle de $|\Psi_k\rangle$ ici. Cela montre que l'énergie calculée au niveau du champ moyen ou au-delà au moyen de forces dépendant de la densité doit être entendue plutôt comme une fonctionnelle de cette densité que comme la valeur moyenne d'un hamiltonien dans un état bien défini. Nous anticipons ainsi l'extention des fonctionnelles de type Skyrme-HF au-delà du voisinage d'un seul champ moyen [187] qui sera présentée dans la suite. Cette extension sera fondée sur le développement perturbatif associé à l'Eq. 13.8 et permettra ainsi de conserver un lien formel avec la force nue. Cette stratégie autorise une dérivation de la fonctionnelle selon une démarche systématique en fonction de l'ordre d'approximation dans le problème à N corps.

Avant d'en arriver là, il faut revenir sur le choix a priori quelconque des coefficients f_α . Dès lors qu'une troncation est effectuée dans le développement perturbatif, le choix de ces coefficients n'est plus anodin et doit être optimisé. En réalité, il s'agit plutôt de faire un choix initialement cohérent des états produit $|\Phi_0^\alpha\rangle$ et des coefficients f_α selon le type de corrélation de basse énergie que l'on veut inclure dans le calcul. Cela est équivalent au choix du mélange de configuration dans les calculs variationnels introduits dans la section 12. Nous allons maintenant étudier deux cas d'application de cette théorie de perturbation.

13.5 GCM.

Une fois choisi le jeu d'états produit le long d'un chemin de contrainte par exemple, l'énergie perturbative peut être minimisée par rapport aux f_α à tous les ordres du développement perturbatif. À l'ordre le plus bas caractérisé par l'Eq. 13.13, cela revient à résoudre le problème aux valeurs propres :

$$\left(\langle \Phi_0^\beta | t + G^{(\beta,\alpha)} | \Phi_0^\alpha \rangle \right) \begin{pmatrix} f_\alpha \end{pmatrix} = E_0^{n=0} \begin{pmatrix} \langle \Phi_0^\beta | \Phi_0^\alpha \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_\alpha \end{pmatrix} , \quad (13.14)$$

écrit sous forme matricielle du fait de la dépendance du "hamiltonien" effectif $t + G^{(\beta,\alpha)}(0,0)$ dans l'élément de matrice $\langle \Phi_0^\beta | \dots | \Phi_0^\alpha \rangle$.

Nous retrouvons précisément les équations de Hill-Wheeler 12.4 dans la base non-orthonormée $|\Phi_0^\alpha\rangle$ avec l'interaction effective appropriée. Ce résultat fonde les calculs GCM du point de vue perturbatif. Cela rappelle que la minimisation associée à la GCM ne relève pas du principe variationnel de Ritz lorsqu'un hamiltonien effectif est utilisé. L'énergie obtenue peut être inférieure à l'énergie vraie du fondamental. Enfin, la minimisation à un ordre plus élevé de la théorie de perturbation correspondra à l'inclusion d'effets diabatiques dans la GCM.

Selon le fondement perturbatif proposé ici, la diagonalisation de la matrice GCM 13.14 fournit plusieurs jeux de “vecteurs propres” $\{f_\alpha^k\}$, $k = 0, 1, 2, \dots$ qui correspondent à différentes approximations de l’énergie du fondamental 13.13 et non pas à des états excités du système; tout ayant été écrit depuis le début pour le vrai fondamental. Les états $|\Psi_k\rangle$ associés sont orthogonaux entre eux mais ne sont pas orthogonaux au vrai fondamental $|\Theta_0\rangle$ dont ils constituent tous une approximation. Il est cependant possible de justifier l’emploi des $|\Psi_k\rangle$, pour $k \geq 1$, comme approximation des états excités du système par un argument de bons sens. En effet, tandis que $|\Psi_0\rangle$ possède a priori un recouvrement maximal avec $|\Theta_0\rangle$, les états $|\Psi_k\rangle$ orthogonaux à $|\Psi_0\rangle$ posséderont un recouvrement important avec les vrais états excités $|\Theta_k\rangle$ correspondants au même ordonnancement des énergies.

13.6 Projection.

Le second cas particulier consiste à se concentrer sur l’état du système plutôt que sur son énergie. Le vrai fondamental $|\Theta_0^\alpha\rangle$ défini par l’Eq. 3.9 obéit aux symétries du hamiltonien H , que la fonction produit $|\Phi_0^\alpha\rangle$ par rapport à laquelle il est développé brise ou non ces symétries. En revanche, la symétrie est brisée dès lors que des diagrammes sont omis dans le développement. Nous allons montrer que la perte d’un bon nombre quantique dans le développement perturbatif de Brueckner-Goldstone peut être restauré dans le cadre de notre théorie de perturbation étendue. Nous traitons pour exemple le cas de la rotation.

Soit un déterminant de Slater $|\Phi_0^0\rangle$, état fondamental d’un champ moyen déformé h_0^0 conservant la symétrie axiale autour de l’axe z . Nous déduisons de cet état l’ensemble des états produit tournés autour d’un axe (axe y) orthogonal à l’axe de symétrie :

$$\begin{aligned} |\Phi_0^\alpha\rangle &= \exp\left(i \frac{\pi\alpha}{n} J_y\right) |\Phi_0^0\rangle, \\ &= R(\alpha) |\Phi_0^0\rangle, \end{aligned} \tag{13.15}$$

pour α variant de $-n$ à n par valeurs entières. Le hamiltonien du système étant invariant sous cette transformation, l’opérateur de rotation $R(\alpha)$ commute avec lui. $|\Phi_0^0\rangle$ étant l’état fondamental non-dégénéré de h_0^0 avec l’énergie \mathcal{E}_0^0 , $|\Phi_0^\alpha\rangle$ sera celui du hamiltonien tourné $h_0^\alpha = R(\alpha) h_0^0 R^\dagger(\alpha)$ avec la même énergie propre. Cette situation correspond au cas particulier de la théorie de perturbation étendue où les vides $|\Phi_0^\alpha\rangle$ ont la même énergie non-perturbée. L’opérateur d’évolution adiabatique écrit dans la représentation d’interaction prend dans le cas présent la forme :

$$\begin{aligned} U_\epsilon^\alpha(t, t_0) &= e^{ih_0^\alpha t/\hbar} U_\epsilon(t, t_0) e^{-ih_0^0 t_0/\hbar} \\ &= R(\alpha) e^{ih_0^0 t/\hbar} R^\dagger(\alpha) e^{-i \int_{t_0}^t H^\alpha(\epsilon, \tau) d\tau/\hbar} R(\alpha) e^{-ih_0^0 t_0/\hbar} R^\dagger(\alpha) \\ &= R(\alpha) U_\epsilon^0(t, t_0) R^\dagger(\alpha) \end{aligned}$$

grâce au fait que le hamiltonien auxiliaire défini par l'Eq 3.8 dépend aussi de α selon la relation :

$$H^\alpha(\epsilon, \tau) = R(\alpha) H^0(\epsilon, \tau) R^\dagger(\alpha) \quad . \quad (13.16)$$

Par conséquent, l'état fondamental tel qu'il est donné par l'Eq. 13.2 se récrit :

$$\begin{aligned} |\Theta_0\rangle &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{\alpha} f_{\alpha} \frac{U_{\epsilon}^{\alpha}(0, -\infty) |\Phi_0^{\alpha}\rangle}{\langle \Phi_0^{\alpha} | U_{\epsilon}^{\alpha}(0, -\infty) | \Phi_0^{\alpha} \rangle} \\ &= \left[\sum_{\alpha} f_{\alpha} R(\alpha) \right] \left[\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{U_{\epsilon}^0(0, -\infty) |\Phi_0^0\rangle}{\langle \Phi_0^0 | U_{\epsilon}^0(0, -\infty) | \Phi_0^0 \rangle} \right] \\ &= \left[\sum_{\alpha} f_{\alpha} R(\alpha) \right] \left[\sum_n \left(\frac{1}{\mathcal{E}_0^0 - h_0^0} G_1^0 \right)^n | \Phi_0^0 \rangle_{\text{Lié/Irré.}} \right] \quad . \end{aligned} \quad (13.17)$$

Alors, si les coefficients du mélange f_{α} vérifient l'Eq. 12.19, l'opérateur :

$$\hat{P}_{I0} = \sum_{\alpha=-n}^n f_{\alpha}^{I0} R(\alpha) \quad , \quad (13.18)$$

est le projecteur sur le spin total I , de composante M sur l'axe z^1 . Finalement, l'Eq. 13.17 s'écrit sous la forme compacte :

$$|\Theta_0\rangle = \hat{P}_{I0} |\Theta_0^0\rangle \quad , \quad (13.19)$$

la projection étant triviale si aucune approximation n'est faite sur $|\Theta_0^0\rangle$. Pour un noyau pair-pair, $|\Theta_0^0\rangle$ ayant un spin nul, cette projection donne le vecteur nul pour $I \neq 0$ et l'identité pour $I = 0$.

La théorie de perturbation étendue revient donc ici à restaurer la symétrie brisée dans le développement usuel de Goldstone-Brueckner en projetant l'état approché. D'après l'Eq. 13.17, cela consiste à réaliser une combinaison linéaire des développements diagrammatiques tournés à partir du développement de $|\Theta_0^0\rangle$. Cette formulation généralise la méthode du champ moyen projeté à la projection des états corrélés à tous les ordres de la théorie de perturbation. De plus, la méthode permet d'inclure au passage la sommation des échelles de Brueckner de manière cohérente à travers l'utilisation des matrices de Brueckner tournées $R(\alpha) G^0 R^\dagger(\alpha)$ pour chaque composante de la fonction approchée.

Etudions maintenant le développement de l'énergie. Du fait que \hat{P}_{I0} commute avec H et satisfait à $\hat{P}_{I0}^2 = \hat{P}_{I0}$, l'énergie vraie de l'état fondamental définie par l'Eq. 13.5 devient :

¹L'opérateur de projection est plus compliqué pour $M \neq 0$ ou dans le cas d'une fonction de champ moyen $|\Phi_0^0\rangle$ ne possédant pas la symétrie axiale, mais le calcul peut être étendu sans difficulté majeure.

$$E_0 = \frac{\langle \Theta_0^0 | H \hat{P}_0 | \Theta_0^0 \rangle}{\langle \Theta_0^0 | \hat{P}_0 | \Theta_0^0 \rangle} , \quad (13.20)$$

qui inclue une somme simple sur α . Afin d'aboutir à la forme 13.8, il faut encore éliminer les divergences associées à l'interaction V issue de H . La matrice de Brueckner généralisée régularisant le cœur dur s'écrit :

$$\begin{aligned} G^{(0,\alpha)}(W'_0, W_0) &= V + G^0(W'_0) \frac{Q^0}{W'_0 - h_0^0} V \\ &+ V R(\alpha) \frac{Q^0}{W_0 - h_0^0} G^0(W_0) R^\dagger(\alpha) \\ &+ G^0(W'_0) \frac{Q^0}{W'_0 - h_0^0} V R(\alpha) \frac{Q^0}{W_0 - h_0^0} G^0(W_0) R^\dagger(\alpha) , \end{aligned} \quad (13.21)$$

et dépend de l'élément de matrice $\langle \Theta_0^0 | \dots R(\alpha) | \Theta_0^0 \rangle$ dans lequel elle intervient. Nous constatons une simplification par rapport au cas général puisque seules une matrice de Brueckner $G^{\alpha=0}$ et k matrices $G^{(0,\alpha)}$ doivent être calculées. Une fois ces corrélations à deux corps sommées dans l'interaction, l'énergie à l'ordre le plus bas dans la matrice $G^{\alpha=0}$ s'écrit :

$$E_0^{n=0} = \frac{\sum_{\alpha=-n}^n f_\alpha^{00} \langle \Phi_0^0 | [t + G^{(0,\alpha)}(0, 0)] R(\alpha) | \Phi_0^0 \rangle}{\sum_{\alpha=-n}^n f_\alpha^{00} \langle \Phi_0^0 | R(\alpha) | \Phi_0^0 \rangle} . \quad (13.22)$$

Elle prend donc la forme de l'énergie de champ moyen projeté 12.16 pour $I = 0$ avec l'interaction effective appropriée $G^{(0,\alpha)}(0, 0)$. Deux remarques restent à faire.

En accord avec la discussion menée dans la section 13.4, la fonction corrélée :

$$|\Psi_0\rangle = \hat{P}_{00} |\Phi_0^0\rangle , \quad (13.23)$$

décrit l'état fondamental approché du système associé à l'énergie 13.23.

Bien que la projection du vrai fondamental $|\Theta_0^0\rangle$ pour $I \neq 0$ donne le vecteur nul, tel n'est pas le cas pour la projection d'un état approché de ce fondamental. De nouveau, et pour les mêmes raisons d'orthogonalité, il n'est pas illogique de considérer l'Eq. 13.22 et l'Eq. 13.23 pour $I \neq 0$ comme des approximations de l'énergie et de la fonction d'onde des vrais états excités $|\Theta_I\rangle$ du système.

13.7 Approximation de densité locale pour la matrice de Brueckner.

L'interaction effective $G^{(\beta,\alpha)}(W_\beta, W_\alpha)$ obtenue dans la théorie de perturbation étendue s'exprime en fonction de deux matrices de Brueckner standards $G^\beta(W_\beta)$ et $G^\alpha(W_\alpha)$. Rappelons ici quelques propriétés de ces matrices de réaction :

- L'interaction G^α resomme des effets à N corps via l'opérateur $Q^\alpha/(W_\alpha - h_0^\alpha)$. La valeur de W_α dépend de la position de l'interaction G^α dans un diagramme donné. À cette position, l'élément de matrice $\langle \alpha_m \alpha_n | G^\alpha | \alpha_p \alpha_q \rangle$ dépend de l'énergie $\epsilon_{\alpha_p} + \epsilon_{\alpha_q} - W_\alpha$ à travers le dénominateur de $Q^\alpha/(W_\alpha - h_0^\alpha)$.
- Par voie de conséquence, $G^{(\beta, \alpha)}$ inclue également des effets à N corps. Les valeurs de W_β et W_α dépendent du reste du diagramme à l'endroit où se trouve l'interaction. Ces valeurs fixées, l'élément de matrice $\langle \beta_m \beta_n | G^{(\beta, \alpha)} | \alpha_p \alpha_q \rangle$ dépend des énergies $\epsilon_{\beta_m} + \epsilon_{\beta_n} - W_\beta$ et $\epsilon_{\alpha_p} + \epsilon_{\alpha_q} - W_\alpha$.

Le problème que l'on se pose est de savoir si les effets de milieu en question peuvent se réduire en une dépendance dans les densités locales à travers une série d'approximations raisonnables. Si tel est le cas, il nous sera possible de déduire la dépendance correspondante des forces effectives phénoménologiques induite par les sommations de Brueckner dans le cadre des calculs de mélange de configurations.

Les éléments de matrice de l'interaction G^α sont bien définis dans la base $\{\alpha\}$ qui diagonalise h_0^α (voir annexe A). La transformation dans l'espace de configuration s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle \alpha_m \alpha_n | G^\alpha | \alpha_p \alpha_q \rangle &= \sum_{\zeta_{z1} \dots t_{z1} \dots} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}'_1 d\vec{r}'_2 \langle \alpha_m \alpha_n | \vec{r}_1 \zeta_{z1} t_1 \vec{r}_2 \zeta_{z2} t_2 \rangle \\ &\quad \langle \vec{r}_1 \zeta_{z1} t_1 \vec{r}_2 \zeta_{z2} t_2 | G^\alpha | \vec{r}'_1 \zeta'_{z1} t'_1 \vec{r}'_2 \zeta'_{z2} t'_2 \rangle \langle \vec{r}'_1 \zeta'_{z1} t'_1 \vec{r}'_2 \zeta'_{z2} t'_2 | \alpha_p \alpha_q \rangle, \end{aligned} \quad (13.24)$$

où $\langle \vec{r}'_1 \zeta'_{z1} t'_1 \vec{r}'_2 \zeta'_{z2} t'_2 | \alpha_p \alpha_q \rangle$ est une fonction produit à deux corps antisymétrisée. L'Eq. 3.14 satisfaite par G^α s'écrit dans l'espace de configuration² :

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1 \zeta_{z1} t_1 \vec{r}_2 \zeta_{z2} t_2 | G^\alpha | \vec{r}'_1 \zeta'_{z1} t'_1 \vec{r}'_2 \zeta'_{z2} t'_2 \rangle &= \langle \vec{r}_1 \zeta_{z1} t_1 \vec{r}_2 \zeta_{z2} t_2 | V | \vec{r}'_1 \zeta'_{z1} t'_1 \vec{r}'_2 \zeta'_{z2} t'_2 \rangle \\ &\quad + \langle \vec{r}_1 \zeta_{z1} t_1 \vec{r}_2 \zeta_{z2} t_2 | V \frac{Q^\alpha}{W_\alpha - h_0^\alpha} G^\alpha | \vec{r}'_1 \zeta'_{z1} t'_1 \vec{r}'_2 \zeta'_{z2} t'_2 \rangle, \end{aligned} \quad (13.25)$$

où $\langle \vec{r}_1 \zeta_{z1} t_1 \vec{r}_2 \zeta_{z2} t_2 | G^\alpha | \vec{r}'_1 \zeta'_{z1} t'_1 \vec{r}'_2 \zeta'_{z2} t'_2 \rangle$ est lié à l'élément de matrice initial dans la représentation α par sa dépendance en $\epsilon_{\alpha_p} + \epsilon_{\alpha_q}$. Dans l'Eq 13.25, nous insérons deux fois l'opérateur identité sous forme de relations de complétude entre les opérateur V et $Q^\alpha/(W_\alpha - h_0^\alpha)$ d'une part et $Q^\alpha/(W_\alpha - h_0^\alpha)$ et G^α d'autre part. Du fait de l'Eq. 2.4 définissant l'interaction nue et du caractère diagonal de $Q^\alpha/(W_\alpha - h_0^\alpha)$ dans la base à deux corps $\{|\alpha_r \alpha_s\rangle\}$:

$$\frac{Q^\alpha}{W_\alpha - h_0^\alpha} = \sum_{\substack{\epsilon_{\alpha_r} > \epsilon_F^\alpha \\ \epsilon_{\alpha_s} > \epsilon_F^\alpha}} \frac{|\alpha_r \alpha_s\rangle \langle \alpha_r \alpha_s|}{\epsilon_{\alpha_p} + \epsilon_{\alpha_q} - W_\alpha - \epsilon_{\alpha_r} - \epsilon_{\alpha_s}}, \quad (13.26)$$

²Il n'est pas nécessaire d'antisymétriser les éléments de matrice dans l'espace de coordonnées puisque cela est fait pour G^α dans la représentation α .

nous obtenons :

$$\langle \vec{r}_1 \zeta_{z1} t_1 \vec{r}_2 \zeta_{z2} t_2 | V \frac{Q^\alpha}{W_\alpha - h_0^\alpha} G^\alpha | \vec{r}'_1 \zeta'_{z1} t'_1 \vec{r}'_2 \zeta'_{z2} t'_2 \rangle = \quad (13.27)$$

$$\sum_{\zeta_{z3} \zeta_{z4} t_3 t_4} \langle \zeta_{z1} t_1 \zeta_{z2} t_2 | V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2, \vec{p}_1 - \vec{p}_2, \hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\tau}_1, \hat{\tau}_2) | \zeta_{z3} t_3 \zeta_{z4} t_4 \rangle \int d\vec{r}_3 d\vec{r}_4$$

$$\langle \vec{r}_1 \zeta_{z3} t_3 \vec{r}_2 \zeta_{z4} t_4 | \frac{Q^\alpha}{W_\alpha - h_0^\alpha} | \vec{r}_3 \zeta_{z3} t_3 \vec{r}_4 \zeta_{z4} t_4 \rangle \langle \vec{r}_3 \zeta_{z3} t_3 \vec{r}_4 \zeta_{z4} t_4 | G^\alpha | \vec{r}'_1 \zeta'_{z1} t'_1 \vec{r}'_2 \zeta'_{z2} t'_2 \rangle .$$

Penchons nous sur l'opérateur $Q^\alpha / (W_\alpha - h_0^\alpha)$ responsable des effets de milieu et donc des éventuelles dépendances dans les densités locales. Ses éléments de matrice dans l'espace des coordonnées s'écrivent :

$$\langle \vec{r}_1 \zeta_{z3} t_3 \vec{r}_2 \zeta_{z4} t_4 | \frac{Q^\alpha}{W_\alpha - h_0^\alpha} | \vec{r}_3 \zeta_{z3} t_3 \vec{r}_4 \zeta_{z4} t_4 \rangle = \sum_{\substack{\epsilon_{\alpha_r} > \epsilon_{F_{t_3}}^\alpha \\ \epsilon_{\alpha_s} > \epsilon_{F_{t_4}}^\alpha}} \frac{\phi_{\alpha_s}^*(\vec{r}_4) \phi_{\alpha_s}(\vec{r}_2) \phi_{\alpha_r}^*(\vec{r}_3) \phi_{\alpha_r}(\vec{r}_1)}{\epsilon_{\alpha_p} + \epsilon_{\alpha_q} - W_\alpha - \epsilon_{\alpha_r} - \epsilon_{\alpha_s}} . \quad (13.28)$$

Cet élément de matrice non-antisymétrisé est diagonal en isospin. Les états à deux corps $|\alpha_r \alpha_s\rangle$ impliqués dans la somme sur les états de particules sont tels que $(t_r = t_3 = t_p, t_s = t_4 = t_q)$ ou $(t_r = t_3 = t_q, t_s = t_4 = t_p)$. Nous spécifions l'isospin des deux nucléons en interaction dans la somme à travers deux énergies de Fermi indicées par ces nombres quantiques $\epsilon_{F_{t_3}}^\alpha$ et $\epsilon_{F_{t_4}}^\alpha$. D'un autre côté, ces énergies de Fermi ne dépendent pas du spin puisque nous ne considérons que des mers de Fermi saturées en spin dans les Eq. 13.26 et Eq. 13.28. Cela signifie que nous avons implicitement limité notre étude aux états 0^+ des noyaux pair-pair. Nous reviendrons sur ce point par la suite.

Afin d'obtenir une approximation de densités locales pour l'élément de matrice 13.25, la matrice densité à un corps doit apparaître dans le numérateur de l'Eq. 13.28. Pour cela, une moyenne sur le dénominateur en énergie est nécessaire afin de le rendre indépendant des indices de somme (α_r, α_s) . Dans la plupart des travaux traitants de l'approximation locale de la matrice de Brueckner, la procédure consiste à remplacer ce dénominateur par une moyenne appropriée sur la mer de Fermi dans la matière nucléaire [66, 67, 98]. Cette moyenne dépend naturellement de l'énergie de Fermi, qui peut être transformée en une dépendance dans la densité totale du système. À son tour, cette dépendance sera transformée en une dépendance dans la densité locale lorsque l'on s'intéresse à un noyau fini. Accompagnant cette procédure du développement de la matrice densité (DME) apparaissant alors au dénominateur, la complète dépendance de l'interaction effective en la densité locale est finalement obtenue [66, 67, 98].

Cette stratégie introduite par Negele et Vautherin semble de notre point de vue difficile à justifier formellement. En effet, trois types d'énergies doivent en réalité être distinguées dans le dénominateur en énergie de l'Eq. 13.28.

La première, $\epsilon_{\alpha_p} + \epsilon_{\alpha_q}$, correspond à l'énergie non-perturbée du ket à deux corps de l'élément de matrice de G^α considéré. Cette énergie est fixe dans la somme apparaissant

dans le membre de droite de l'Eq. 13.28. Il semble en effet raisonnable de la moyenner sur la mer de Fermi puisque seuls les éléments de matrice de G^α correspondant à des états $|\alpha_p \alpha_q\rangle$ dans la mer de Fermi sont utiles au calcul de l'énergie à l'approximation de BHF. Il n'en reste pas moins que l'énergie de Fermi est une quantité globale du noyau, plus liée au nombre de neutrons et de protons (N,Z) qu'à une densité locale au centre de masse des deux nucléons en interaction. D'ailleurs, bien qu'utilisant cette procédure avec succès, Negele en a relevé le caractère douteux sur le plan formel [67].

La seconde énergie correspond au paramètre W_α induisant une dépendance non-triviale des éléments de matrice de G^α relativement à sa position dans le diagramme. Une fois donnée cette position, W_α est le même pour tous les éléments de matrice 13.24. À l'ordre le plus bas de la théorie de perturbation (étendue ou non), ce paramètre est nul puisque les matrices de Brueckner sont prises sur couche d'énergie.

La dernière, $\epsilon_{\alpha_r} + \epsilon_{\alpha_s}$, rend le dénominateur de l'Eq. 13.28 dépendant des indices de somme α_r et α_s . Elle provient de chaque propagateur libre à deux corps dans l'échelle de Brueckner et porte sur les états de particule jusqu'aux énergies infinies. Par conséquent elle ne correspond en rien à une énergie dans la mer de Fermi. De plus, cette dépendance en énergie constitue une pondération pour chaque paire d'états apparaissant dans l'échelle, et à ce titre, se trouve fortement liée au numérateur dans l'Eq. 13.28. L'omission de ce lien abandonne une part essentielle de la physique contenue dans la resommation de Brueckner en donnant un poids identique à tous les états de particule quelque soit leur énergie non perturbée. Cette procédure standard revient finalement à considérer l'opérateur de Pauli :

$$\langle \vec{r}_1 \zeta_{z3} t_3 \vec{r}_2 \zeta_{z4} t_4 | Q^\alpha | \vec{r}_3 \zeta_{z3} t_3 \vec{r}_4 \zeta_{z4} t_4 \rangle = (\delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_4) - \rho_{t_4}^\alpha(\vec{r}_2, \vec{r}_4)) (\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_3) - \rho_{t_3}^\alpha(\vec{r}_1, \vec{r}_3)) \quad , \quad (13.29)$$

comme la quantité cruciale à traiter en détails dans l'opérateur $Q^\alpha / (W_\alpha - h_0^\alpha)$. C'est à ce stade que la DME est réalisée [66, 67], faisant apparaître les densités locales scalaires indicées par l'isospin $\rho_{t_p}^\alpha(\vec{R})$ et $\rho_{t_q}^\alpha(\vec{R})$.

Cette procédure soulève donc des questions. Une simplification de la matrice G étant malgré tout nécessaire à la réalisation de calculs de structure extensifs, on pourrait préférer une approximation locale de la "densité d'énergie" 13.28 (en moyennant $\epsilon_{\alpha_p} + \epsilon_{\alpha_q} - W_\alpha$ d'une manière raisonnable afin d'obtenir une interaction indépendante de l'énergie à chaque position dans le diagramme). Le développement de cette densité d'énergie réalisée selon le même mode que la DME devrait être d'une qualité similaire à celui de la matrice densité [66]. Cependant, cela ne conduit pas à une interaction dépendant des densités locales standards ($\rho_t^\alpha(\vec{R})$, $\nabla^2 \rho_t^\alpha(\vec{R})$, $\tau_t^\alpha(\vec{R}) \dots$).

Malgré les faiblesses que nous venons de souligner, il n'existe pas à ce jour de travaux pleinement cohérents permettant d'approximer l'élément de matrice 13.28 par une fonctionnelle des densités locales. Aussi, nous abandonnons l'idée d'obtenir la dépendance dans les densités locales associée à l'opérateur $Q^\alpha / (W_\alpha - h_0^\alpha)$.

Chapitre 14

Dépendance en densité de la force due aux corrélations à deux corps.

14.1 Ansatz.

Nous nous intéressons dans cette section à l'approximation locale de l'interaction effective $G^{(\beta,\alpha)}$ lorsqu'elle est utilisée à l'ordre le plus bas dans le calcul de l'énergie. Cela constitue une simplification importante puisqu'elle est sur couche d'énergie dans ce cas. Étant données les conclusions de la section précédente, nous postulons que l'élément de matrice 13.28 peut être approché par une quantité locale et de portée nulle :

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1 \zeta_{z3} t_3 \vec{r}_2 \zeta_{z4} t_4 | \frac{Q^\alpha}{W_\alpha - h_0^\alpha} | \vec{r}_3 \zeta_{z3} t_3 \vec{r}_4 \zeta_{z4} t_4 \rangle &\approx \mathcal{K} [\rho_{t_3}^\alpha(\vec{r}_1), \rho_{t_4}^\alpha(\vec{r}_2)] \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_3) \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_4) \\ &\approx \mathcal{F} [\rho_0^\alpha(\vec{R})] \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_3) \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_4) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) , \end{aligned} \quad (14.1)$$

où $\mathcal{F}(\mathcal{K})$ est une fonctionnelle a priori inconnue de(s) la densité(s) locale(s) scalaire(s) isoscalaire (proton et/ou neutron) associée(s) à l'état produit $|\Phi_0^\alpha\rangle$.

Comme suggéré par les Eq. 13.29 et 14.1, l'interaction effective devrait également dépendre de la densité locale isovectorielle lorsque les deux nucléons en interaction n'ont pas le même isospin. Cependant, les forces phénoménologiques utilisées aujourd'hui dépendent uniquement de la densité isoscalaire au centre de masse, que les nucléons en interaction aient ou non le même isospin. Cela est satisfaisant pour les noyaux proches de la stabilité même si une remise en cause pourrait être nécessaire pour les noyaux exotiques.

D'autre part, la DME, que nous gardons comme motivation pour comprendre la forme 14.1, suggère une dépendance additionnelle de \mathcal{F} en une série de puissances des coordonnées relatives $\vec{r}_1 - \vec{r}_3$ et $\vec{r}_2 - \vec{r}_4$ [67]. Devraient également s'ajouter des termes correctifs dépendant des dérivées secondes des densités locales $\rho_t^\alpha(\vec{R})$ et des densités cinétiques $\tau_t^\alpha(\vec{R})$ pour rendre compte de la non-localité de l'opérateur $Q^\alpha / (W_\alpha - h_0^\alpha)$.

Pour les systèmes brisant l'invariance par renversement du temps, la DME fait apparaître une dépendance dans les densités de courant $\vec{j}_t^\alpha(\vec{R})$, tandis que pour les systèmes non saturés en spin, une dépendance dans les densités de spin $\vec{s}_t^\alpha(\vec{R})$ et de courant de

spin $\vec{J}_t^\alpha(\vec{R})$ devrait être considérée. L'Eq. 14.1 correspond finalement à une approximation purement locale en $\vec{r}_1 - \vec{r}_3$ et $\vec{r}_2 - \vec{r}_4$. Cette approximation, correcte dans la limite des grandes densités est particulièrement crue à la surface du noyau. La prise en compte de dépendances supplémentaires, bien que toujours possible, compliquerait grandement les développements théoriques présentés dans la suite ainsi que les calculs numériques. Ainsi, aucune d'entre elles ne sera prise en compte explicitement en accord avec la forme actuelle des forces de Gogny et de Skyrme, le manque correspondant devant être corrigé à travers le caractère phénoménologique de ces forces.

D'un autre côté, nous pouvons être plus confiant dans l'approximation de portée nulle en $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$ des éléments de matrice de $Q^\alpha / (W_\alpha - h_0^\alpha)$ puisque ceux-ci sont entourés de deux interactions V dans les éléments de matrice de G^α [66]. Cette portée nulle est responsable de la dépendance de $\rho_{t_3}^\alpha$ et $\rho_{t_4}^\alpha$ en \vec{R} , plutôt qu'en \vec{r}_1 et \vec{r}_2 respectivement dans l'Eq. 14.1.

Utilisant l'ansatz 14.1, et sachant que l'opérateur $\vec{p} = \vec{p}_1 - \vec{p}_2$ n'agit pas sur \vec{R} , l'élément de matrice 13.25 devient¹ :

$$\begin{aligned} \langle \zeta_{z1} t_1 \zeta_{z2} t_2 | G_{LDA}^\alpha(\vec{R}, \vec{r}, \vec{p}, \hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\tau}_1, \hat{\tau}_2) - V(\vec{r}, \vec{p}, \hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\tau}_1, \hat{\tau}_2) | \zeta'_{z1} t'_1 \zeta'_{z2} t'_2 \rangle = \\ \mathcal{F} \left[\rho_0^\alpha(\vec{R}) \right] \langle \zeta_{z1} t_1 \zeta_{z2} t_2 | V(\vec{r}, \vec{p}, \hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\tau}_1, \hat{\tau}_2) G_{LDA}^\alpha(\vec{R}, \vec{r}, \vec{p}, \hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\tau}_1, \hat{\tau}_2) | \zeta'_{z1} t'_1 \zeta'_{z2} t'_2 \rangle . \end{aligned} \quad (14.2)$$

Introduisons une relation de complétude dans l'espace de signature/isospin entre V et G_{LDA}^α , itérons l'Eq. 14.2 puis éliminons cette relation de complétude. Nous obtenons alors une relation valable pour tous les éléments de matrice de G_{LDA}^α dans l'espace de signature/isospin qui s'écrit, sans préciser les dépendances de V et G_{LDA}^α dans les opérateurs $\hat{\sigma}_1$, $\hat{\sigma}_2$ et $\hat{\tau}_1, \hat{\tau}_2$, sous la forme :

$$\begin{aligned} G_{LDA}^\alpha(\vec{R}, \vec{r}, \vec{p}) &= \sum_{l=0}^{\infty} V^{l+1}(\vec{r}, \vec{p}) \mathcal{F}^l \left[\rho_0^\alpha(\vec{R}) \right] \\ &= V(\vec{r}, \vec{p}) + V^2(\vec{r}, \vec{p}) \mathcal{F} \left[\rho_0^\alpha(\vec{R}) \right] + V^3(\vec{r}, \vec{p}) \mathcal{F}^2 \left[\rho_0^\alpha(\vec{R}) \right] + \dots \end{aligned} \quad (14.3)$$

Passons maintenant à la matrice de Brueckner généralisée $G^{(\beta, \alpha)}$. Utilisant l'Eq. 13.7 et l'Eq. 14.3 pour G^α et pour G^β , nous obtenons après quelques manipulations :

¹Le sigle “LDA” désigne usuellement l'approximation de densité locale ou “Local Density Approximation”.

$$\begin{aligned}
G_{LDA}^{(\beta, \alpha)}(\vec{R}, \vec{r}, \vec{p}) &= \sum_{l=1}^{\infty} V^l(\vec{r}, \vec{p}) \frac{\mathcal{F}^l[\rho_0^\beta(\vec{R})] - \mathcal{F}^l[\rho_0^\alpha(\vec{R})]}{\mathcal{F}[\rho_0^\beta(\vec{R})] - \mathcal{F}[\rho_0^\alpha(\vec{R})]} \\
&= V(\vec{r}, \vec{p}) + V^2(\vec{r}, \vec{p}) \left\{ \mathcal{F}[\rho_0^\beta(\vec{R})] + \mathcal{F}[\rho_0^\alpha(\vec{R})] \right\} \\
&\quad + V^3(\vec{r}, \vec{p}) \left\{ \mathcal{F}^2[\rho_0^\beta(\vec{R})] + \mathcal{F}[\rho_0^\beta(\vec{R})] \mathcal{F}[\rho_0^\alpha(\vec{R})] + \mathcal{F}^2[\rho_0^\alpha(\vec{R})] \right\} + \dots
\end{aligned} \tag{14.4}$$

Cette approximation de l'interaction effective fondée sur des manipulations d'ordre général est encore trop compliquée et demande à être simplifiée. Cela dit, nous pouvons d'ores et déjà conclure sur un point important. La structure de l'Eq. 14.4 montre que quelle que soit la forme explicite de la fonctionnelle \mathcal{F} , $G_{LDA}^{(\beta, \alpha)}$ ne dépendra ni de la densité mixte ni de la densité corrélée, mais des densités locales de champ moyen $\rho_0^\alpha(\vec{R})$ et $\rho_0^\beta(\vec{R})$ relatives aux deux états produit impliqués dans l'élément de matrice $\langle \Phi_0^\beta | t + G^{(\beta, \alpha)} | \Phi_0^\alpha \rangle$.

14.2 Simplification.

Procédons à présent à quelques simplifications. Les forces de Gogny ou de Skyrme ayant été interprétées comme des matrices de Brueckner à l'approximation de densité locale [182, 67], nous désirons identifier la dépendance en densité de $G_{LDA}^{(\beta, \alpha)}(\vec{R}, \vec{r}, \vec{p})$ à la leur lorsqu'un terme diagonal ($\beta = \alpha$) est considéré dans l'Eq. 14.4. Nous traitons ci-dessous le cas de la force de Skyrme.

Afin d'identifier $G_{LDA}^{(\alpha, \alpha)}(\vec{R}, \vec{r}, \vec{p})$ à $v_{Skyrme}(\vec{R}, \vec{r}, \vec{k}, \overleftarrow{k})$ définie par l'Eq 4.69, la force tenseur doit être négligée dans l'interaction nue et un développement à l'ordre deux dans la portée de toutes les puissances de la force nue, doit être effectué². Une fois ce développement en \vec{r} formellement réalisé pour $V^l(\vec{r}, \vec{p})$, les termes issus de la force centrale et de l'interaction spin-orbit sont regroupés pour obtenir :

$$\begin{aligned}
V^l(\vec{r}, \vec{k}, \overleftarrow{k}) &\approx V_0(l) \delta(\vec{r}) \\
&\quad + V_1(l) (\delta(\vec{r}) \vec{k}^2 + \overleftarrow{k}^2 \delta(\vec{r})) \\
&\quad + V_2(l) \overleftarrow{k} \cdot \delta(\vec{r}) \vec{k} \\
&\quad + V_3(l) (\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2) \overleftarrow{k} \wedge \delta(\vec{r}) \vec{k} ,
\end{aligned} \tag{14.5}$$

où la dépendance originale en \vec{p} provenant du terme spin-orbit est maintenant notée \overleftarrow{k} dans le dernier terme de l'Eq. 14.5. Dans cette équation, les coefficients $V_i(l)$ incorporent une dépendance en $\hat{\sigma}_1$, $\hat{\sigma}_2$ et $\hat{\tau}_1 \cdot \hat{\tau}_2$ provenant de V^l . D'un point de vue général, il n'est malheureusement pas possible pour une interaction V d'exprimer les coefficients du développement de $V^l(\vec{r}, \vec{p})$ en fonction de l ou en fonction de ceux de $V(\vec{r}, \vec{p})$.

²La force de Gogny fait également usage d'un terme dépendant de la densité de portée nulle.

Seuls les termes indépendants des vitesses doivent présenter une dépendance en densité si l'on veut assimiler $G_{LDA}^{(\alpha,\alpha)}(\vec{R}, \vec{r}, \vec{p})$ à une force de type Skyrme. Ainsi, le développement 14.5 est coupé à l'ordre zéro en \vec{k} et \vec{k}' pour $l \geq 2$, ce qui permet d'obtenir à partir de l'Eq. 14.4 :

$$\begin{aligned}
G_{LDA}^{(\beta,\alpha)}(\vec{R}, \vec{r}, \vec{k}, \vec{k}') &\approx V_0(1) \delta(\vec{r}) \\
&+ V_1(1) (\delta(\vec{r}) \vec{k}^2 + \vec{k}'^2 \delta(\vec{r})) \\
&+ V_2(1) \vec{k}' \cdot \delta(\vec{r}) \vec{k} \\
&+ V_3(1) (\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2) \vec{k}' \wedge \delta(\vec{r}) \vec{k} \\
&+ \sum_{l=2}^{\infty} V_0(l) \frac{\mathcal{F}^l [\rho_0^\beta(\vec{R})] - \mathcal{F}^l [\rho_0^\alpha(\vec{R})]}{\mathcal{F} [\rho_0^\beta(\vec{R})] - \mathcal{F} [\rho_0^\alpha(\vec{R})]} \delta(\vec{r}) \quad .
\end{aligned} \tag{14.6}$$

14.3 Champ Moyen.

Afin d'identifier effectivement $G_{LDA}^{(\alpha,\alpha)}(\vec{R}, \vec{r}, \vec{k}, \vec{k}')$ à une force de Skyrme telle qu'elle est définie au niveau du champ moyen, il faut considérer l'expression 14.6 pour $\alpha = \beta$. Ce faisant, l'identification est possible à condition de tronquer le développement en série apparaissant dans $G_{LDA}^{(\beta,\alpha)}$ à l'ordre 2 en \mathcal{F} , de prendre :

$$\mathcal{F} [\rho_0^\alpha(\vec{R})] = a \left(\rho_0^\alpha(\vec{R}) \right)^\sigma, \tag{14.7}$$

où a est une constante, et d'établir la correspondance formelle entre les coefficients :

$$\begin{aligned}
t_0 (1 + x_0 P_\sigma) &\Leftrightarrow V_0(1) \\
\frac{1}{2} t_1 (1 + x_1 P_\sigma) &\Leftrightarrow V_1(1) \\
t_2 (1 + x_2 P_\sigma) &\Leftrightarrow V_2(1) \\
\frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 P_\sigma) &\Leftrightarrow 2 a V_0(2) \\
iW_0 &\Leftrightarrow V_3(1) \quad .
\end{aligned} \tag{14.8}$$

L'Eq. 14.7 peut être comprise comme une détermination phénoménologique de \mathcal{F} reposant sur la forme existante des forces phénoménologiques. La valeur de l'exposant σ a fait l'objet de nombreux débats. D'abord, des arguments généraux ont été en faveur de $\sigma = 2/3$ [185] tandis que l'ajustement d'éléments de matrice diagonaux de la matrice de Brueckner au niveau de Fermi, calculés à partir de forces réalistes, a donné des valeurs comme $\sigma = 1/6$ [188] ou $1/3$ [189], et cela pour plusieurs canaux de spin-isospin. D'autres calculs de cette nature étaient plutôt en faveur de $\sigma = 1$ pour la courte portée et $\sigma = 1/3$ pour la longue portée [66, 190]. Enfin, l'ajustement des forces phénoménologiques a fourni tout un éventail de valeurs pour cet exposant, allant de $\sigma = 1$ pour les premières versions des forces de Skyrme [215] à $\sigma = 1/6$ pour les plus récentes [125]. Il faut cependant garder à l'esprit que ces ajustements englobent nécessairement l'effet des dépendances en densité issues d'origines physiques différentes (voir section 12.5).

14.4 Extension au mélange d'états produit.

Nous pouvons maintenant étendre la dépendance en densité de l'interaction effective au cas non-diagonal ($\alpha \neq \beta$). Nous procédons pour cela de la même façon que pour l'interaction diagonale en tronquant la série au premier ordre en \mathcal{F} et en utilisant la détermination phénoménologique 14.7 de cette fonctionnelle. Ce faisant, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
 v_{Skyrme}^{(\beta,\alpha)}(\vec{R}, \vec{r}, \vec{k}, \overleftarrow{k'}) &= t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}) \\
 &+ \frac{1}{2} t_1 (1 + x_1 P_\sigma) (\delta(\vec{r}) \vec{k}^2 + \overleftarrow{k'}^2 \delta(\vec{r})) \\
 &+ t_2 (1 + x_2 P_\sigma) \overleftarrow{k'} \cdot \delta(\vec{r}) \vec{k} \\
 &+ \frac{1}{12} t_3 (1 + x_3 P_\sigma) \left\{ [\rho_0^\beta(\vec{R})]^\sigma + [\rho_0^\alpha(\vec{R})]^\sigma \right\} \delta(\vec{r}) \\
 &+ iW_0 (\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2) \overleftarrow{k'} \wedge \delta(\vec{r}) \vec{k} ,
 \end{aligned} \tag{14.9}$$

comme extension naturelle d'une force de Skyrme à utiliser dans l'élément de matrice $\langle \Phi_0^\beta | H^{(\beta,\alpha)} | \Phi_0^\alpha \rangle$. Le rôle symétrique joué dans la formule 14.9 par les densités associées au bra d'une part, et au ket d'autre part, permet d'écrire le hamiltonien mixte sous la forme :

$$H^{(\beta,\alpha)} [\rho_0^\beta(\vec{R}), \rho_0^\alpha(\vec{R})] = \frac{1}{2} \left\{ H [\rho_0^\beta(\vec{R})] + H [\rho_0^\alpha(\vec{R})] \right\} , \tag{14.10}$$

où $H [\rho_0(\vec{R})]$ est le hamiltonien de champ moyen pour l'état produit $|\Phi_0\rangle$. Comme cela a été dit dès l'obtention de l'Eq 14.4, la prescription dérivée est différente de celles utilisées jusqu'à ce jour dans les calculs de GCM ou de projection.

Ce résultat a été obtenu au moyen d'une séquence d'approximations raisonnables bien que nombreuses. Les dernières équations ont été dérivées pour coller au plus près des forces de Skyrme afin de bénéficier de leur succès considérable au niveau du champ moyen. Le schéma développé est cependant plus général et permettrait si nécessaire d'éviter certaines approximations. Par exemple, une portée finie pourrait être conservée, ou du moins les termes dépendant à la fois des vitesses et des densités comme suggéré dans la Ref. [189]. Il serait également possible de considérer les puissances d'ordres supérieurs en \mathcal{F} dans l'Eq. 14.4 ou dans l'Eq. 14.6. Comme discuté plus haut, la dépendance initiale dans la densité isovectorielle pourrait être conservée en vue de l'étude des noyaux exotiques. Pour finir, la dépendance en énergie de l'interaction devrait être également conservée étant donné son rôle significatif [78]. Ces généralisations correspondent à des formes analytiques de la force de Skyrme (ou de Gogny) au niveau du champ moyen pas encore envisagées à ce jour.

Utilisant la force de Skyrme généralisée telle qu'elle est définie par l'Eq. 14.9, l'énergie de l'état fondamental 13.13 correspondant à l'ordre le plus bas de la théorie de perturbation s'écrit :

$$E_0^{n=0} \equiv \frac{\langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \equiv \frac{\sum_{\alpha,\beta} f_\beta^{0*} f_\alpha^0 \langle \Phi_0^\beta | H^{(\beta,\alpha)} [\rho_0^\beta(\vec{R}), \rho_0^\alpha(\vec{R})] | \Phi_0^\alpha \rangle}{\sum_{\alpha,\beta} f_\beta^{0*} f_\alpha^0 \langle \Phi_0^\beta | \Phi_0^\alpha \rangle} \quad (14.11)$$

$$= \sum_{\alpha,\beta} f_\beta^{0*} f_\alpha^0 \int d\vec{R} \mathcal{H}^{(\beta,\alpha)}(\vec{R}) \quad (14.12)$$

où $\mathcal{H}^{(\beta,\alpha)}(\vec{R})$ est une fonctionnelle des densités locales uniquement. Celle-ci inclut la dépendance dans les densités locales scalaire-isoscalaire de champ moyen issue de la définition de $v_{Skymc}^{(\beta,\alpha)}$, mais aussi la dépendance dans les densités locales mixtes issues des contractions non-diagonales dans l'expression 14.11. Notons que les densités impaires sous l'opération de renversement du temps issues de ces contractions sont toujours non nulles dans le contexte des mélanges de configurations. Cela engendre la présence de densités de spin, de densités de courant ou encore de la composante vectorielle de la densité d'énergie cinétique dans la fonctionnelle, même pour un noyau pair-pair. La formule explicite de la fonctionnelle de Skyrme pour les mélanges de configuration est donnée dans la Ref. [172], mais doit être modifiée pour rendre compte de la nouvelle prescription pour la dépendance en densité de la force.

Rappelons la stratégie adoptée dans la présente dérivation. Le but n'a pas été de dériver explicitement les termes de la force de Skyrme avec leurs coefficients en fonction de ceux de la force nue, mais simplement de retrouver une correspondance formelle avec la force de Skyrme afin d'obtenir la dépendance en densité associée aux opérateurs $Q^\alpha/(W_\alpha - h_0^\alpha)$ et $Q^\beta/(W_\beta - h_0^\beta)$ apparaissant au niveau de la matrice de Brueckner généralisée.

Une stratégie plus proche du travail de Negele et Vautherin [66, 67, 98] aurait pu être invoquée dans la dernière partie du calcul. Ainsi, après nous être appuyé sur la DME pour définir la forme locale du vertex effectif, le développement dans la portée de celle-ci permettant de retrouver une force de type Skyrme aurait pu être remplacé par un développement local additionnel de la densité d'énergie $\mathcal{H}^{(\beta,\alpha)}(\vec{R}, \vec{r})$ dérivée à partir de l'interaction de portée finie $G_{LDA}^{(\beta,\alpha)}$ correspondant à l'Eq. 14.4. Cela consisterait à travailler directement sur la fonctionnelle plutôt que sur l'interaction à deux corps.

Tandis que la même dépendance en densité issue de la resommation des échelles de Brueckner aurait été obtenue dans la formule finale 14.12, des expressions différentes seraient obtenues pour la dépendance dans les densités mixtes locales. La fonctionnelle serait formellement identique à celle dérivée de la force à deux corps généralisée $v_{Skymc}^{(\beta,\alpha)}$ sauf que les coefficients des différents termes deviendraient eux-mêmes dépendants des densités mixtes locales. Dans le cas standard faisant usage d'un seul vide, ces coefficients varient doucement autour de la densité de saturation, validant la stratégie utilisée ici [66, 67]. Dans la matière nucléaire à plusieurs fois la densité de saturation, cette dépendance des coefficients dans la densité devient importante à prendre en compte. Un avantage formel du développement local de la densité d'énergie $\mathcal{H}^{(\beta,\alpha)}(\vec{R}, \vec{r})$ par la DME vis à vis du développement en la portée de la force effective concerne le découplage des coefficients des termes pairs et impairs sous renversement du temps [191]. C'est en ces termes que se justifie

la stratégie consistant à découpler les coefficients dans la fonctionnelle de Skyrme [32, 37] (voir la discussion dans l'annexe E).

Nous obtenons donc une extension de la validité de la fonctionnelle de Skyrme au cas des mélanges d'états produit de type GCM ou champ moyen projeté sur la base d'un développement perturbatif de l'énergie vraie. En ce sens, la fonctionnelle ne prend en compte que les corrélations proprement définies à cet ordre d'approximation du problème à N corps et n'est pas vue comme un moyen de resommer l'ensemble des corrélations manquantes. Cette propriété se traduit par l'utilisation d'un vertex effectif à quatre pattes externes $G^{(\beta, \alpha)}$ conservant, au moins formellement, un lien avec la force nucléon-nucléon libre.

14.5 Projection.

Illustrons le résultat précédent dans le cas particulier des restaurations de symétrie. Plus spécifiquement, nous considérons la restauration du moment angulaire dans l'état fondamental lorsque l'invariance par rotation est brisée par une fonction à symétrie axiale au niveau du champ moyen. Ce cas correspond aux calculs présentés dans la section 13.6. La prescription obtenue revient à remplacer $G^{(0, \alpha)}$ par la force de Skyrme généralisée $v_{Skyrme}^{(0, \alpha)}(\vec{R}, \vec{r}, \vec{k}, \vec{k}')$ dans la formule de l'énergie 13.22, ce qui donne pour l'état fondamental de spin nul :

$$E_0^{n=0} = \frac{\sum_{\alpha=-n}^n f_{\alpha}^{00} \langle \Phi_0^0 | \left[t + v_{Skyrme}^{(0, \alpha)} \right] R(\alpha) | \Phi_0^0 \rangle}{\sum_{\alpha=-n}^n f_{\alpha}^{00} \langle \Phi_0^0 | R(\alpha) | \Phi_0^0 \rangle}, \quad (14.13)$$

où $v_{Skyrme}^{(0, \alpha)}$ dépend des densités de champ moyen des deux états produit $|\Phi_0^0\rangle$ et $R(\alpha)|\Phi_0^0\rangle$ différant l'un de l'autre par une rotation d'un angle $\pi\alpha/n$ autour de l'axe y . Pour que la prescription obtenue est correctement définie pour les calculs de restauration de symétrie, deux propriétés doivent être vérifiées :

- Comme lors d'un calcul de projection utilisant un hamiltonien nu invariant par rotation, l'énergie 14.13 doit être indépendante de l'orientation des axes dans le référentiel du laboratoire³. En conséquence, l'énergie du champ moyen déformé est indépendante de son orientation intrinsèque dans l'espace.
- La prescription obtenue doit conduire à une énergie réelle⁴.

Dans le présent contexte, la première propriété est immédiatement vérifiée. En effet, la commutation d'un des opérateurs de projection \hat{P}_{00} avec le hamiltonien initial a été réalisée dans l'expression de l'énergie exacte 13.20 avant que toute resommation ou troncation ne soit faite dans le développement perturbatif. Ainsi, la matrice de rotation $R(\alpha)$ n'apparaît qu'à droite de $v_{Skyrme}^{(0, \alpha)}$ dans la formule de l'énergie 14.13. Cette propriété prouve sans

³Il n'est pas nécessaire que $H^{(0, \alpha)}$ soit invariant par rotation.

⁴Il n'est pas nécessaire que $H^{(0, \alpha)}$ soit hermitien.

calcul supplémentaire que les éléments de matrice $\langle \Phi_0^0 | H^{(0,\alpha)} R(\alpha) | \Phi_0^0 \rangle$ ne dépendent que de l'angle relatif entre les deux fonctions produit et donc, que l'énergie projetée est indépendante du choix de l'axe par rapport auquel les angles de rotation sont mesurés dans le référentiel du laboratoire.

La seconde propriété est démontrée en détail dans l'annexe I.

La prescription dérivée à partir de la théorie de perturbation étendue vérifie donc les propriétés (mathématiques) minimales nécessaires à son utilisation dans les calculs de projection. Notons que malgré le manque d'argument fondamental justifiant à ce jour l'utilisation de la densité locale mixte, celle-ci est tout à fait bien définie du point de vue des propriétés mathématiques précédentes pour être utilisée dans les calculs de restauration de symétries [178, 44].

Enfin, tenant compte du fait que l'opérateur densité à un corps commute avec les opérateurs N et Z , il est facile de montrer que la prescription dérivée convient également aux calculs de projection sur le bon nombre de particules.

14.6 Au-delà de l'ordre le plus bas de la théorie de perturbation.

La force de Skyrme généralisée construite à partir de l'interaction $G^{(\beta,\alpha)}$ sur couche d'énergie ne doit pas être a priori utilisée dans les calculs au-delà de l'ordre le plus bas de la théorie de perturbation, c'est à dire au-delà du mélange d'états produit non-orthogonaux. Comme cela a déjà été mentionné, il peut être intéressant dans certains systèmes d'aller au-delà de cet ordre afin d'introduire des effets adiabatiques [56].

Les diagrammes associés ($n_{max} = n'_{max} \neq 0$) font usage de la matrice $G^{(\beta,\alpha)}$ hors couche d'énergie. Dans ce cas, les dénominateurs en énergie apparaissant dans la définition de $G^{(\beta,\alpha)}$ sont modifiés. Dans le contexte de l'approximation locale, cela modifie en principe la fonctionnelle \mathcal{F} pour chaque vertex par rapport à sa définition à l'ordre le plus bas. Cela signifie que l'utilisation de la force 14.9 dans un calcul GCM incluant des excitations individuelles est soumise à caution. Nous ne faisons que mentionner ce point puisqu'aucun résultat issu de tels calculs ne sera présenté dans ce mémoire.

Chapitre 15

Renormalisation des forces à plus de deux corps.

En conclusion de la section 14, nous avons obtenu une prescription pour la dépendance en densité de la force effective issue de la resommation des corrélations à deux corps. Comme explicité dans la section 12.5, il existe d'autres causes de dépendance en densité, l'une d'entre elles étant l'omission des forces à plus de deux corps dans le hamiltonien utilisé.

Nous avons rappelé dans l'introduction les raisons d'inclure des forces à trois corps. Dans la présente section, nous proposons de renormaliser leurs effets sur les états liés du noyaux dans le cas des calculs de mélange de configurations par l'intermédiaire d'une dépendance en densité locale de la force effective à deux corps. Notre but n'est pas d'obtenir une renormalisation exacte, les imperfections de la dérivation seront éventuellement compensées par l'ajustement final de la force phénoménologique. Alors que le calcul sera mené sans traitement des corrélations d'appariement, le résultat sera étendu au canal p-p sans grande difficulté. Notons également que le calcul, fait explicitement dans le cas d'une force à trois corps, sera ensuite étendu au cas des forces à K corps.

Nous faisons donc l'hypothèse que le hamiltonien du système contient une force à trois corps :

$$H^{(3)} = \sum_{i,j} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{4} \sum_{i,j,k,l} \bar{V}_{iljk}^{(2)} c_i^\dagger c_l^\dagger c_k c_j + \frac{1}{36} \sum_{i,j,k,l,m,n} \bar{V}_{iln jkm}^{(3)} c_i^\dagger c_l^\dagger c_n^\dagger c_m c_k c_j , \quad (15.1)$$

où $\bar{V}_{iljk}^{(2)}$ et $\bar{V}_{iln jkm}^{(3)}$ sont des éléments de matrice complètement antisymétrisés. Le hamiltonien 15.1 ainsi que toutes les quantités dans la suite de ce chapitre sont écrites relativement à la base à un corps $\{\varphi_{N\pi}(\vec{r}, \zeta_z, s_z, t)\}$ propre pour la projection du spin et pour l'isospin¹. On note que l'interaction à deux corps $V^{(2)}$ possède déjà le caractère effectif d'une matrice de Brueckner à l'approximation de la densité locale dans le hamiltonien 15.1. Nous oublierons cette propriété dans ce chapitre puisque cela ne ferait qu'alourdir les calculs sans

¹Nous rappelons qu'une lettre minuscule désigne les nombres quantiques d'un état dans leur ensemble tandis que la même lettre en majuscule exclut les nombres (ζ_z, s_z, t) qui doivent être précisés explicitement dans ce cas.

en changer les conclusions. Nous séparons le traitement de la GCM et de la projection puisque la minimisation de l'énergie n'est pas réalisée par rapport aux mêmes paramètres variationnels dans les deux cas.

15.1 GCM et force à trois corps.

Afin d'identifier la dépendance en densité permettant de renormaliser les effets de la force à trois corps, nous calculons et minimisons l'énergie du système pour deux hamiltoniens différents. Tout d'abord, la force à trois corps est explicitement prise en compte mais aucune dépendance en densité n'existe dans la force à deux corps. Ensuite, la force à trois corps est omise et une dépendance en densité est introduite dans la force à deux corps. Dans le second cas le hamiltonien est noté $H_{eff}^{(3)}$.

• Dans le premier cas, le calcul de la valeur moyenne du hamiltonien 15.1 dans l'état corrélé 12.1 donne au moyen du théorème de Wick généralisé [171] :

$$\langle \Psi_k | H^{(3)} | \Psi_k \rangle = \sum_{\beta, \alpha} f_{\beta}^{k*} f_{\alpha}^k \langle \Phi_0^{\beta} | H^{(3)} | \Phi_0^{\alpha} \rangle \quad (15.2)$$

$$= \sum_{\beta, \alpha} f_{\beta}^{k*} f_{\alpha}^k \left[\sum_{i,j} t_{ij} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \bar{V}_{iljk}^{(2)} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} \rho_{kl}^{(\beta, \alpha)} \right. \\ \left. + \frac{1}{6} \sum_{i,j,k,l,m,n} \bar{V}_{iln jkm}^{(3)} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} \rho_{kl}^{(\beta, \alpha)} \rho_{mn}^{(\beta, \alpha)} \right] \langle \Phi_0^{\beta} | \Phi_0^{\alpha} \rangle . \quad (15.3)$$

Ensuite, la minimisation de l'énergie par rapport aux f_{β}^{k*} donne :

$$\sum_{\beta} \frac{\delta}{\delta f_{\beta}^{k*}} \left[\frac{\langle \Psi_k | H^{(3)} | \Psi_k \rangle}{\langle \Psi_k | \Psi_k \rangle} \right] \delta f_{\beta}^{k*} = 0 , \quad (15.4)$$

pour tout δf_{β}^{k*} , ce qui s'écrit explicitement comme un ensemble d'équations couplées prenant la forme :

$$\sum_{\alpha} f_{\alpha}^k \left[\sum_{i,j} t_{ij} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \bar{V}_{iljk}^{(2)} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} \rho_{kl}^{(\beta, \alpha)} \right. \\ \left. + \frac{1}{6} \sum_{i,j,k,l,m,n} \bar{V}_{iln jkm}^{(3)} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} \rho_{kl}^{(\beta, \alpha)} \rho_{mn}^{(\beta, \alpha)} \right] \langle \Phi_0^{\beta} | \Phi_0^{\alpha} \rangle \\ = \mathcal{E}_k^{mel} \sum_{\alpha} f_{\alpha}^k \langle \Phi_0^{\beta} | \Phi_0^{\alpha} \rangle , \quad (15.5)$$

pour tout β .

• Tout en omettant la force à trois corps, nous procédons à présent au même calcul au moyen d'une force effective à deux corps dépendant linéairement de la matrice densité mixte sous la forme² :

$$V_{eff}^{(3)(\beta,\alpha)}(\vec{r}, \vec{R}) = V^{(2)}(\vec{r}) + v(\vec{r}) \rho^{(\beta,\alpha)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad , \quad (15.6)$$

où $\rho^{(\beta,\alpha)}(\vec{r}, \vec{r}')$ est la contraction de la matrice densité mixte sur les variables de spin et d'isospin³ :

$$\begin{aligned} \rho^{(\beta,\alpha)}(\vec{r}, \vec{r}') &= \sum_{s'_z s_z t t'} \frac{\langle \Phi_0^\beta | c^\dagger(\vec{r}' s'_z t') c(\vec{r} s_z t) | \Phi_0^\alpha \rangle}{\langle \Phi_0^\beta | \Phi_0^\alpha \rangle} \\ &= \sum_{ij} \varphi_I^*(\vec{r}', \zeta'_z, s'_z, t') \varphi_J(\vec{r}, \zeta_z, s_z, t) \rho_{ji}^{(\beta,\alpha)} \\ &= \rho_0^{(\beta,\alpha)}(\vec{r}, \vec{r}') + (s_0^{(\beta,\alpha)})_x(\vec{r}, \vec{r}') \quad . \end{aligned} \quad (15.7)$$

Dans ces conditions, le vertex effectif défini par l'Eq. 15.6 dépend de la composante isoscalaire des densités mixtes scalaire et vectorielle. Le fait que $\rho^{(\beta,\alpha)}(\vec{r}, \vec{r}')$ ne dépende pas des composantes isovectorielles est dû au fait que nous nous restreignons aux situations où les états protons et neutrons ne sont pas mélangés. L'interaction définie par l'Eq. 15.6 dépend des indices (β, α) et, est à ce titre utilisée dans l'élément de matrice correspondant $\langle \Phi^\beta | H_{eff}^{(3)(\beta,\alpha)} | \Phi^\alpha \rangle$. Alors, l'énergie associée au mélange de configuration s'écrit :

$$\langle \Psi_k | H_{eff}^{(3)} | \Psi_k \rangle \equiv \sum_{\beta, \alpha} f_\beta^{k*} f_\alpha^k \left[\sum_{i,j} t_{ij} \rho_{ji}^{(\beta,\alpha)} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \left(\bar{V}_{eff}^{(3)(\beta,\alpha)} \right)_{iljk} \rho_{ji}^{(\beta,\alpha)} \rho_{kl}^{(\beta,\alpha)} \right] \langle \Phi_0^\beta | \Phi_0^\alpha \rangle \quad . \quad (15.8)$$

Après avoir développé $\left(\bar{V}_{eff}^{(3)(\beta,\alpha)} \right)_{iljk}$, l'énergie obtenue est formellement identique à celle donnée par l'Eq. 15.3 à condition de remplacer $\bar{V}_{ilnjk m}^{(3)}$ par l'élément de matrice d'une force à trois corps effective prenant la forme :

$$\begin{aligned} v_{ilnjk m} &= 3 \int \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \varphi_i^*(\vec{r}_1) \varphi_l^*(\vec{r}_2) \varphi_n^*(\vec{r}_2) v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2, \vec{p}, \hat{\vec{\sigma}}_1, \hat{\vec{\sigma}}_2, \hat{\vec{\tau}}_1, \hat{\vec{\tau}}_2) \\ &\quad \varphi_m(\vec{r}_1) [\varphi_k(\vec{r}_1) \varphi_j(\vec{r}_2) - \varphi_j(\vec{r}_1) \varphi_k(\vec{r}_2)] \quad . \end{aligned} \quad (15.9)$$

²Afin de ne pas alourdir l'écriture, nous omettons les dépendances de $V_{eff}^{(3)(\beta,\alpha)}$, $V^{(2)}$ et v dans les opérateurs $(\vec{p}, \hat{\vec{\sigma}}_1, \hat{\vec{\sigma}}_2, \hat{\vec{\tau}}_1, \hat{\vec{\tau}}_2)$ dans l'Eq. 15.6

³Se rapporter à l'annexe E pour la définition de certaines quantités utilisées ici.

Définissant une force effective à deux corps dépendant linéairement de la densité mixte, l'énergie de l'état produit $|\Psi_k\rangle$ pour un hamiltonien incluant une force à trois corps est donc reproduite terme à terme, et cela pour tous les indices de spin/isospin. Ce qui est essentiel de retenir ici est le caractère nécessairement *mixte* de la densité utilisée dans la force effective pour obtenir la correspondance terme à terme.

L'équivalence n'est pas complète puisque les éléments de matrice effectifs 15.9 ne pourront simuler tous les éléments de matrice antisymétrisés d'une force à trois corps $V^{(3)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3)$ quelconque, notamment en raison de leur non-antisymétrisation en (k, m) et (j, m) . Malgré tout, le degré de liberté incarné par le choix du terme à deux corps $v(\vec{r}, \vec{p}, \hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\tau}_1, \hat{\tau}_2)$ dans $V_{eff}^{(3)(\beta, \alpha)}$ pourra être utilisé de telle sorte que les éléments de matrice $v_{iln jkm}$ reproduisent au mieux ceux de la force à trois corps sous jacente. À moins de pouvoir dériver la forme de la force à trois corps depuis une théorie microscopique plus fondamentale, la stratégie consistera à choisir une forme assez simple pour v permettant de mener les calculs à bien ; les imperfections concernant la reproduction hypothétique des éléments de matrice de la force à trois corps devant être corrigées au final par l'ajustement de la force phénoménologique sur les données expérimentales.

Ainsi, une force de Skyrme dépendant linéairement de la densité de matière au niveau du champ moyen peut être interprétée comme la réduction au cas $\alpha = \beta$ d'un choix particulier de la force 15.6. Ce choix consiste à prendre une force de portée nulle oubliant toute dépendance éventuelle en impulsion, mais surtout, à ne considérer que la partie *scalaire* de $\rho^{(\beta, \alpha)}(\vec{r}, \vec{r}')$, la portée nulle se chargeant de n'en sélectionner que la partie locale $\rho_0^{(\beta, \alpha)}(\vec{R})$. Le choix de la dépendance en spin/isospin de v se résume traditionnellement à l'utilisation de l'opérateur d'échange de spin sous la forme du facteur $(1 + x_3 P_\sigma)$.

Notons que la réduction à une dépendance dans la partie scalaire de la matrice densité est une limitation significative pour la reproduction d'une force à trois corps. En effet, les éléments de matrice $v_{iln jkm}$ non-diagonaux en (n_{s_z}, m_{s_z}) ne sont pas pris en compte dans ce cas-là. Cela est valable pour tous les systèmes en raison de la non-nullité de la partie locale de la densité mixte vectorielle pour les systèmes pair-pair. Concernant la forme de v , une portée, ou pour le moins une dépendance dans l'impulsion relative a été considérée dans certaines études [128]. Cette généralisation semble poser des problèmes de stabilité pour l'équation de la matière nucléaire symétrique [125]. Quoiqu'il en soit, la présente dérivation suggère la manière dont ces formulations simples pourraient être étendues, et généralise surtout la définition de la force effective aux éléments de matrice non-diagonaux ($\alpha \neq \beta$) nécessaires au calcul de l'énergie pour les mélanges de configuration.

Si l'on varie maintenant l'énergie 15.8 par rapport aux f_β^{k*} , les mêmes équations du mouvement 15.5 que dans le cas du hamiltonien $H^{(3)}$ sont obtenues. Notons que le choix de la densité mixte dans $V_{eff}^{(3)(\beta, \alpha)}(\vec{r}, \vec{R})$ conduit à un terme de réarrangement nul du fait de l'indépendance de $\rho^{(\beta, \alpha)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ vis à vis des coefficients du mélange f_β^{k*} :

$$\Gamma_{\delta V} = \sum_{\beta, \alpha} f_\beta^{k*} f_\alpha^k \langle \Phi^\beta | \frac{\partial V_{eff}^{(3)(\beta, \alpha)}(\vec{r}, \vec{R})}{\partial \rho^{(\beta, \alpha)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} \frac{\partial \rho^{(\beta, \alpha)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}{\partial f_\beta^{k*}} | \Phi^\alpha \rangle / \langle \Psi_k | \Psi_k \rangle = 0 \quad . \quad (15.10)$$

Finalement, la contribution de la force à trois corps aux Eq. 15.5 est reproduite par la seule redéfinition de la force à deux corps. Comme cela est montré dans l'annexe J, l'uti-

lisation de la densité corrélée engendrerait l'apparition de termes superflus, notamment en raison de la non nullité du terme de réarrangement 15.10 dans ce cas.

15.2 Projection et force à trois corps.

Nous traitons maintenant la même question du point de vue des calculs de projection. Dans ce cas, la VAP n'est pas réalisée par rapport aux coefficients du mélange, mais par rapport aux fonctions individuelles définissant les fonctions produit mélangées. Une paramétrisation appropriée des fonctions produit doit être choisie. Nous prenons donc :

$$|\Psi_I\rangle = \hat{P}_I |\Phi\rangle \quad , \quad (15.11)$$

où $|\Phi\rangle$ s'écrit par rapport à l'état fixe de référence $|\Phi_0\rangle$:

$$|\Phi\rangle = e^{\frac{1}{2} \sum_{u,u'} Z_{uu'}^I c_u^\dagger c_{u'}} |\Phi_0\rangle \quad . \quad (15.12)$$

La variation de l'énergie moyenne dans l'état $|\Psi_I\rangle$ est faite par rapport aux paramètres $Z_{uu'}^I$ et s'écrit :

$$\begin{aligned} \delta \frac{\langle \Psi_I | H^{(3)} | \Psi_I \rangle}{\langle \Psi_I | \Psi_I \rangle} &= \frac{1}{2} \sum_{u,u'} \left[\frac{\langle \Psi_I | c_u^\dagger c_{u'} H^{(3)} | \Psi_I \rangle}{\langle \Psi_I | \Psi_I \rangle} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\langle \Psi_I | c_u^\dagger c_{u'} | \Psi_I \rangle \langle \Psi_I | H^{(3)} | \Psi_I \rangle}{\langle \Psi_I | \Psi_I \rangle^2} \right] \delta Z_{uu'}^I \\ &= 0 \quad , \end{aligned} \quad (15.13)$$

pour tout $\delta Z_{uu'}^I$. Les équations du mouvement prennent la forme :

$$\langle \Psi_I | c_u^\dagger c_{u'} H^{(3)} | \Psi_I \rangle = \mathcal{E}_I^{mel} \langle \Psi_I | c_u^\dagger c_{u'} | \Psi_I \rangle \quad , \quad (15.14)$$

pour tout couple (u, u') . Ces équations ne sont valables que s'il n'y a pas de terme de réarrangement. C'est le cas pour le hamiltonien $H^{(3)}$. L'expression explicite de ces équations du mouvement en fonction de la matrice densité mixte est donnée dans l'annexe K.1.

Comme pour GCM, nous considérons dans un deuxième temps le hamiltonien $H_{eff}^{(3)}$. Dans ce cas, un terme de réarrangement non-nul apparaît dans les équations du mouvement. Le calcul correspondant est effectué dans l'annexe K.2. La comparaison entre la contribution provenant de la force à trois corps et celle issue de la redéfinition de la force à deux corps et du terme de réarrangement y est également réalisée. Ce calcul montre comment l'équivalence terme à terme est de nouveau obtenue grâce au choix de la densité mixte dans l'interaction à deux corps.

15.3 Généralisation au cas des forces à K corps.

L'équivalence entre une force à trois corps et une force à deux corps dépendant linéairement de la densité mixte vient d'être montrée dans le cadre des mélanges de configuration. Cependant, la plupart des forces phénoménologiques utilisées aujourd'hui dépendent de la densité selon une fonction ρ^σ , avec σ plus petit que 1 (1/6 pour la force de Skyrme SLy4 [125]). Même si une telle dépendance ne renormalise pas que l'effet des forces à plus de deux corps, essayons de l'interpréter dans ce contexte. Pour cela, nous développons la dépendance en densité en série entière autour de la densité de saturation de la matière nucléaire ρ_{sat} :

$$\rho^\sigma = \rho_{sat}^\sigma \sum_n a_n^{(\sigma)} \left(\frac{\rho - \rho_{sat}}{\rho_{sat}} \right)^n, \quad (15.15)$$

$$\approx \rho_{sat}^\sigma \sum_{k=0}^K b_k^{(\sigma)} \left(\frac{\rho}{\rho_{sat}} \right)^k. \quad (15.16)$$

Le domaine de validité du développement 15.15 est $]0, 2\rho_{sat}[$. Nous le réorganisons en puissances successives de ρ . Ce faisant, chaque coefficient du nouveau développement diverge puisqu'il n'existe pas de développement en série autour de zéro pour ρ^σ avec $\sigma \notin \mathbb{N}$. Afin de résoudre ce problème, coupons la série 15.15 à un ordre fini $n = K$. De cette manière, nous obtenons un développement de ρ^σ valable sur le domaine $[\epsilon(K), \rho_{sat}]^4$ dont les termes, en nombre fini, peuvent être réordonnés en fonction de ρ^k . Cela conduit au développement 15.16 où les $b_k^{(\sigma)}$ ne divergent pas.

Dans la suite, nous utilisons ce développement dans le but d'interpréter la dépendance en ρ^σ comme une renormalisation de forces jusqu'à K corps dans le hamiltonien initial $H^{(K)}$; le terme linéaire de l'Eq. 15.16 étant relié à la force à trois corps, la puissance deux à la force à quatre corps etc... Partant de cette idée, il est effectivement possible de montrer selon la même technique que celle utilisée dans la section précédente que la force à deux corps :

$$V_{eff}^{(K)(\beta, \alpha)}(\vec{r}, \vec{R}) = V^{(2)}(\vec{r}) + v(\vec{r}) \rho_{sat}^\sigma \sum_{k=1}^{K-2} b_k^{(\sigma)} \left(\frac{\rho_0^{(\beta, \alpha)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}{\rho_{sat}} \right)^k, \quad (15.17)$$

permet de reproduire l'énergie d'un état corrélé $|\Psi_k\rangle$ associée à un hamiltonien incluant des forces à deux, trois, quatre, ... K corps. Les éléments de matrice non-antisymétrisés $v_{il...jk...}^{(p)p}$ de la force effective à "p-corps" correspondante sont définis à partir du terme $v(\vec{r}) \rho_{sat}^{\sigma+2-p} b_{p-2}^{(\sigma)} \left(\rho_0^{(\beta, \alpha)}(\vec{R}) \right)^{p-2}$ selon le même procédé, et avec les mêmes limitations, que les $v_{iln,jkm}$ dans la section 15.1. Le point crucial est que cette analogie ne fonctionne que si la densité *mixte* est utilisée dans le hamiltonien effectif.

Pour finir, notons que ces calculs conduits au moyen de fonctions produit HFB mènent à la même conclusion quant à la dépendance en densité dans le canal p-p, à condition que

⁴Naturellement, $\epsilon(K) \longrightarrow 0$ pour $K \longrightarrow \infty$.

seuls les termes jusqu'à l'ordre deux dans le tenseur d'appariement soient conservés dans l'énergie.

15.4 La force de Skyrme pour les calculs au-delà du champ moyen.

Nous concluons l'étude formelle de la partie III en donnant la force de Skyrme généralisée renormalisant à la fois les corrélations à deux corps *et* l'effet des forces à plus de deux corps pour les calculs de type GCM ou projection :

$$\begin{aligned}
v_{Skyrme}^{(\beta,\alpha)}(\vec{R}, \vec{r}, \vec{k}, \vec{k}') &= t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}) \\
&+ \frac{1}{2} t_1 (1 + x_1 P_\sigma) (\delta(\vec{r}) \vec{k}^2 + \vec{k}'^2 \delta(\vec{r})) \\
&+ t_2 (1 + x_2 P_\sigma) \vec{k}' \cdot \delta(\vec{r}) \vec{k} \\
&+ \frac{1}{12} X t_3 (1 + x_3 P_\sigma) \left\{ [\rho_0^\beta(\vec{R})]^\sigma + [\rho_0^\alpha(\vec{R})]^\sigma \right\} \delta(\vec{r}) \\
&+ \frac{1}{6} (1 - X) t_3 (1 + x_3 P_\sigma) [\rho_0^{(\beta,\alpha)}(\vec{R})]^\sigma \delta(\vec{r}) \\
&+ iW_0 (\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2) \vec{k}' \wedge \delta(\vec{r}) \vec{k} ,
\end{aligned} \tag{15.18}$$

où X est un paramètre ajustable traduisant notre méconnaissance du poids relatif des deux effets renormalisés par les dépendances en densités. D'après les résultats de la section 14.5 et des Ref. [178, 44], cette dépendance en densité généralisée vérifie les propriétés requises quant à son utilisation dans les calculs de projection. Les deux termes dépendants des densités qui apparaissent dans $v_{Skyrme}^{(\beta,\alpha)}$ redonnent la prescription usuelle à l'approximation du champ moyen de telle sorte que les Eq. 4.69 et 15.18 coïncident pour $\alpha = \beta$.

Il faut cependant être conscient que si cela est vrai pour le *type* de densité, le choix d'avoir la même fonctionnelle pour les deux termes est lié à la stratégie utilisée. En particulier, l'exposant σ des termes de densité n'a aucune raison d'être identique dans les deux cas. Il semblerait raisonnable au vu des chapitres 14 et 15 de différencier les deux termes ; la prédominance des forces à trois corps sur celles impliquant plus de nucléons pencherait vers un exposant proche de 1 pour le terme correspondant, tandis que le terme trouvant son origine dans la renormalisation du cœur dur garderait une valeur inférieure à 1. De la même façon, la dépendance en spin $(1 + x_3 P_\sigma)$ pourrait être différente pour les deux termes. Une telle différenciation constitue sans doute une option plus réaliste mais nécessite un ré-ajustement de la force au niveau du champ moyen qui n'a pas été envisagé dans ce travail. Quoi qu'il en soit, le point important est de constater dans quelle mesure le fait d'aller au-delà du champ moyen distingue les deux origines de la dépendance en densité et ouvre un nouveau degré de liberté dans l'interaction.

Chapitre 16

Calculs auto-cohérents.

La généralisation de la force de Skyrme doit maintenant être testée au moyen de calculs quantitatifs. Le premier objectif est d'évaluer l'influence du choix de densité pour les différents mélanges de configurations. En effet, bien que la prescription dérivée ici soit différente de celles utilisées jusqu'à ce jour (on retrouve la densité mixte locale pour le seul cas $X = 0$ dans la formule 15.18), rien ne prouve que son utilisation ait un impact significatif sur les observables physiques. Afin d'étudier cette influence, il est nécessaire de sélectionner des systèmes pour lesquels les effets dynamiques au-delà du champ moyen, et en particulier le choix de la densité spatiale dans le hamiltonien, sont importants a priori. Par exemple on n'attendra pas la même sensibilité de la part de la GCM sur une coordonnée de déformation ou de la projection sur le moment angulaire que de la projection sur le nombre de particules qui mélange des états produit ayant des densités spatiales identiques. Le second objectif est de contraindre la valeur du paramètre X déterminant le poids relatif des deux types de dépendance en densité dans l'interaction.

Pour cela, nous présentons dans cette section les résultats d'une étude portant sur le phénomène de coexistence de formes dans le ^{186}Pb . Les effets des corrélations vibrationnelles quadrupolaires, de la projection sur le bon nombre de particules et de la projection sur le moment angulaire sont successivement inclus dans le traitement théorique afin d'analyser l'influence de la dépendance en densité pour chacun des mélanges de configurations correspondants. À chaque fois, les calculs sont réalisés et comparés à l'expérience pour trois valeurs représentatives du paramètre X : -0.5 , 0 et 0.5 .

16.1 Coexistence de formes dans le ^{186}Pb .

La spectroscopie des noyaux de plomb déficients en neutrons est particulièrement intéressante en raison du phénomène de coexistence de formes qui s'y produit. Ce phénomène, qui dans certains cas mène à la disparition des couches magiques traditionnelles (couches $N = 20$ et $N = 28$ dans les isotones riches en neutron) se manifeste dans ces systèmes par l'existence d'isomères de forme à basse énergie. Ainsi, au moins un état $I^\pi = 0^+$ à moins de 1 MeV d'excitation a été observé pour chaque isotope pair-pair entre le ^{182}Pb et le ^{190}Pb [192, 193, 194, 195, 196, 197], les cas les plus exceptionnels étant le ^{188}Pb [198, 199] et le ^{186}Pb [198, 200] où deux de ces états ont été observés en dessous de 700 keV. Dans les noyaux impairs voisins de Tl et de Bi , des états construits sur des

orbitales proton au dessus ($1h_{11/2}$) et en dessous ($3s_{1/2}$) du gap magique $Z = 82$ ont été observés à des énergies d'excitation de quelques centaines de keV [201, 202]. Dans ce travail, nous étudions le ^{186}Pb et essayons de reproduire à plusieurs niveaux d'approximations les deux états 0^+ de basse énergie.

16.1.1 Origine de la coexistence de forme dans le ^{186}Pb .

Les isomères étudiés correspondent à des états dont la forme macroscopique est modifiée par rapport à celle de l'état fondamental du fait du réarrangement d'un nombre très limité de nucléons à la surface de Fermi. Ainsi, tandis que l'état fondamental des isotopes de plombs reste toujours sphérique [203, 204], l'état 0^+ observé à 532 keV d'énergie d'excitation dans le ^{186}Pb s'interprète comme un état à 2p-2t protons sur le fondamental dans le langage du modèle en couche sphérique [200] et comme un état oblate dans le langage du champ moyen déformé. De la même façon, l'état 0^+ observé à 650 keV s'interprète comme un état prolate ou comme un état à 4p-4t protons. Le caractère exceptionnel de l'existence d'isomères aussi bas en énergie apparaît à la faveur de la comparaison entre leur énergie d'excitation observée d'une part, et le coût énergétique associé à la promotion de deux ou quatre protons au dessus du gap magique $Z = 82$ d'autre part. En effet, ce coût s'élève respectivement à $2 * 3.9 = 7.8$ MeV et à $4 * 3.9 = 15.6$ MeV. Deux éléments expliquent cependant la réalisation d'une telle situation dans le cas des isotopes de plomb déficients en neutrons.

La base de l'explication repose sur le passage de 0 à 4 et 8 protons de valence lors de la promotion des 2 et 4 protons au dessus du gap magique. Cela apporte tout d'abord un gain substantiel d'énergie d'appariement. Ensuite, cela enclenche l'interaction quadrupole-quadrupole proton-neutron, d'autant plus attractive que le nombre de neutrons de valence est maximum dans le ^{186}Pb . En effet, $N = 104$ se situe exactement à mi-couche entre les nombres magiques $N = 82$ et $N = 126$. Par exemple, l'état oblate bénéficie pleinement de sa structure à 2p-2t lorsque les orbitales intruses ($1h_{9/2}, m_z = \pm 9/2$) plongent et deviennent occupées en passant sous la paire ($3s_{1/2}, m_z = \pm 1/2$). En effet, l'interaction quadrupole-quadrupole est maximisée par la déformation oblate lorsque les protons occupent les états ($1h_{9/2}, m_z = \pm 9/2$) du fait de leur forte probabilité de présence dans le plan orthogonal à l'axe principal de déformation. L'effet auto-cohérent des deux processus identifiés peut finalement contrebalancer le coût associé à la promotion des protons au-dessus du gap magique.

La reproduction quantitative des isomères de forme dans le ^{186}Pb est cependant un test sévère pour les modèles et les forces phénoménologiques utilisés. En effet, aucun calcul existant n'a permis d'y parvenir de manière satisfaisante. Cette remarque couvre à la fois les calculs de type champ moyen auto-cohérent et au-delà [56, 57], mais aussi des calculs fondés sur la méthode de Strutinski [205] ou sur l'utilisation couplée de fonctions d'onde à N corps plus élaborées et d'un hamiltonien relativement schématique [57, 206]. En effet, l'extrême sensibilité des résultats vis à vis de plusieurs paramètres du problème tels que le spectre de particules indépendantes, le traitement de l'appariement et l'inclusion de corrélations a été démontrée. Ainsi, tandis que la stabilité du gap magique $Z = 82$ n'est pas remise en cause dans ces noyaux exotiques [207], l'énergie des isomères dépend très directement de la taille du gap engendré par l'interaction [208]. Ensuite, une

étude des effets adiabatiques sur cette coexistence de formes a montré l'importance de la modélisation de l'appariement à travers le choix de la force et de son intensité [56]. En ce sens, on imagine aisément l'impact des effets dynamiques associés à la restauration du bon nombre de nucléons dans la fonction d'onde. Les calculs de projection correspondants n'ont jamais été réalisés dans cette région. Enfin, l'existence et la position des isomères sont très sensibles au couplage engendré par l'interaction résiduelle entre les configurations associées aux différentes formes statiques ainsi qu'à l'effet des corrections rotationnelles. Notons que les calculs de projection sur le moment angulaire utilisant des forces effectives "réalistes" n'ont jamais été réalisés dans des systèmes aussi lourds.

16.1.2 Approximation statique.

Le premier niveau d'approximation pour approcher ce problème est évidemment celui du champ moyen. Il est possible de se faire une idée de la coexistence de forme en traçant l'énergie des configurations statiques en fonction d'un paramètre de déformation du noyau. Pour cela, nous avons réalisé des calculs HFBCSLN contraints sur le moment quadrupolaire axial $\hat{Q}_{20} = 2z^2 - x^2 - y^2$ afin de construire la courbe d'énergie potentielle adiabatique (états de plus basse énergie) pour des déformations allant de $q_{20} \equiv \langle \Phi(q_{20}) | \hat{Q}_{20} | \Phi(q_{20}) \rangle = -40b$ à $q_{20} = +50b$. Etant données les conclusions de la Ref. [209], nous n'incluerons pas la triaxialité dans cette étude.

Les états contraints s'écrivent d'après l'Eq. 4.38 :

$$|\Phi(q_{20})\rangle = \prod_{l>0} \left(u_l(q_{20}) + v_l(q_{20}) a_l^\dagger(q_{20}) a_l^\dagger(q_{20}) \right) |0\rangle, \quad (16.1)$$

où la base HF $\{a_l^\dagger(q_{20})\}$ ainsi que les occupations BCS $\{u_l(q_{20}), v_l(q_{20})\}$ dépendent de la déformation. La prescription de Lipkin-Nogami (LN) est utilisée pour s'affranchir de la pathologie associée à l'annulation de l'appariement proton autour de la sphéricité. Les fonctions ainsi obtenues constituent un meilleur ordre zéro en vue du calcul de projection sur le bon nombre de particules qui sera réalisé par la suite.

La partie gauche de la Fig. 16.1 donne le spectre HF de protons. La largeur du gap magique $Z = 82$ à la sphéricité est égale à $\epsilon_{1h_{9/2}} - \epsilon_{3s_{1/2}} = 5.6$ MeV. Cette valeur est à comparer aux 3.7 MeV obtenus avec la force de Skyrme SIII [215]. Du côté des déformations oblate, nous trouvons la paire d'états intrus $[541\ 9/2]$ provenant de la couche sphérique $1h_{9/2}$, très plongeante avec la déformation et qui coupe la paire d'états $[440\ 1/2]$ à $q_{20} = -10b$. La largeur importante du gap $Z = 82$ obtenu ici explique le décalage de ce croisement par rapport à celui obtenu avec SIII qui avait lieu à $q_{20} = -8b$ [56]. Du côté des déformations prolate, nous observons la présence de trois paires d'états intrus $[530\ 1/2]$, $[541\ 1/2]$, $[521\ 3/2]$, provenant des couches $1h_{9/2}$, $2f_{7/2}$ et $1h_{9/2}$, et coupant respectivement le niveau de Fermi à $q_{20} = +12b$, $q_{20} = +18b$ et $q_{20} = +20b$.

La partie droite de la Fig. 16.1 présente le spectre HF de neutrons. À l'inverse des protons, le nombre de neutrons correspond au milieu de couche. La densité d'états au niveau de Fermi est donc plus grande que pour les protons et aucune paire d'orbitales ne joue de rôle particulier. On note malgré tout une densité d'états plus faible aux déformations prolate que pour les protons.

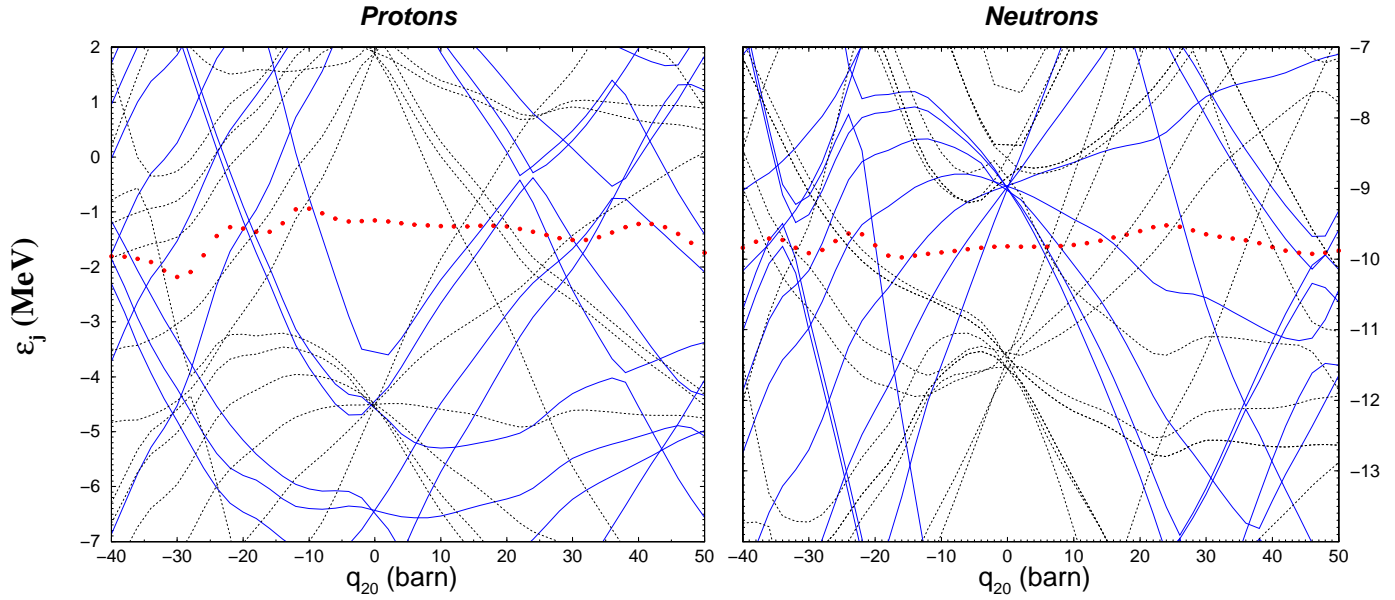


FIG. 16.1 – Spectres de particules indépendantes en fonction de la déformation quadrupolaire dans le ^{186}Pb . Les conventions pour la parité sont : + = lignes pleines, - = lignes pointillées. Les ronds désignent les potentiels chimiques correspondants.

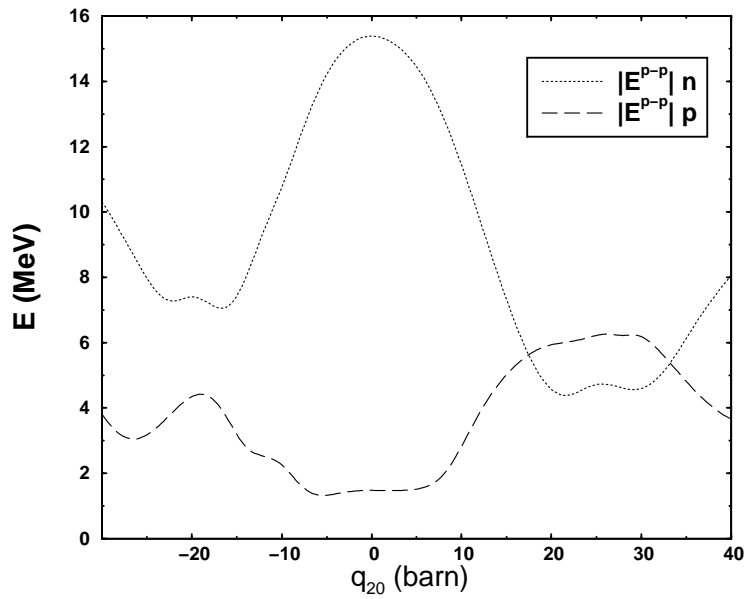


FIG. 16.2 – Valeur absolue des énergies d'appariement proton et neutron en fonction de la déformation quadrupolaire.

La Fig. 16.2 donne la valeur absolue des énergies d'appariement proton et neutron en fonction de la déformation quadrupolaire. L'évolution de ces énergies de corrélations reflète la variation des densités d'états proton et neutron qui se fait en opposition de phase en fonction de la déformation. On identifie également l'effet de la prescription de LN puisque l'énergie d'appariement proton ne s'annule pas dans le voisinage de la sphéricité et reste au minimum de l'ordre du MeV. Finalement, le fait que l'appariement proton favorise la sphéricité tandis que l'appariement neutron favorise les déformations oblate et prolata explique la grande sensibilité des propriétés de déformation et donc du phénomène de coexistence de forme vis à vis du traitement et de l'intensité respectif de ces corrélations.

De fait, la courbe d'énergie potentielle du ^{186}Pb est un compromis délicat issu de l'influence combinée des caractéristiques des champs HF de neutrons et de protons et des champs d'appariement. Comme le montre la Fig. 16.3, la courbe d'énergie tracée en fonction de q_{20} présente trois minima locaux. En premier lieu, le fondamental est trouvé sphérique en accord avec les calculs [207] et avec l'expérience [203, 204]. On observe ensuite un minimum oblate ($q_{20} = -12b$) et un minimum prolata ($18 < q_{20} < 22b$) dont les déformations reflètent directement le remplissage des états intrus protons identifiés sur la partie gauche de la Fig. 16.1. Cela confirme le rôle joué par ces états dans le phénomène de coexistence de forme dans cette région. L'énergie d'excitation des minima obtenue à l'approximation de champ moyen surestime assez nettement les données expérimentales. En effet, les isomère oblate et prolata sont respectivement trouvés à des énergies de 1353 keV et de 1778 keV, tandis que les deux états 0^+ sont observés à des énergies respectives de 532 et 650 keV. Dans notre calcul, ces deux minima sont séparés du fondamental par des barrières de hauteurs respectives égales à 200 et 560 keV. Ces faibles valeurs laissent à penser que les couplages entre les configurations statiques vont être importants.

Sur cette même figure sont tracées les courbes d'énergie potentielle associées aux états auto-cohérents à deux qps, invariants par renversement du temps, construits sur les paires d'orbitales intruses. Ces états sont calculés selon la méthode décrite dans la section 4.2.5. Les courbes d'énergie potentielle correspondantes sont tracées pour des zones restreintes de déformation autour de leur minimum absolu respectif. L'écart minimal entre la courbe d'énergie potentielle adiabatique à 0 qp et celles associées aux états à 2qps varie de 969 keV ([541 1/2], $q_{20} = +16b$) à 1678 keV ([521 3/2], $q_{20} = +18b$) tandis qu'il est de 1230 keV ($q_{20} = -12b$) pour la paire intruse [541 9/2] dont les effets diabatiques associés ont été étudiés dans la Ref. [56] pour ce même noyau. Au vu des conclusions de cette étude et de la petitesse de l'énergies d'excitation trouvée ici, on s'attend à ce que ces effets diabatiques jouent un rôle significatif quant aux caractéristiques de l'état collectif oblate. La petitesse de l'énergie d'excitation minimale des autres configurations à deux qps laissent à penser que les mêmes effets devraient être importants pour l'état prolata. Ces orbites jouant malgré tout un rôle moins marqué que la précédente, il est difficile de conclure quant à leur influence sans avoir réalisé le calcul correspondant. Tout en gardant ces remarques à l'esprit, nous ne présenterons ici que des mélanges construits sur la famille adiabatique d'états à 0 qp. Nous rappelons que l'inclusion d'effets diabatiques nécessiteraient en toute rigueur une redéfinition de la force de Skyrme donnée par l'Eq. 15.18.

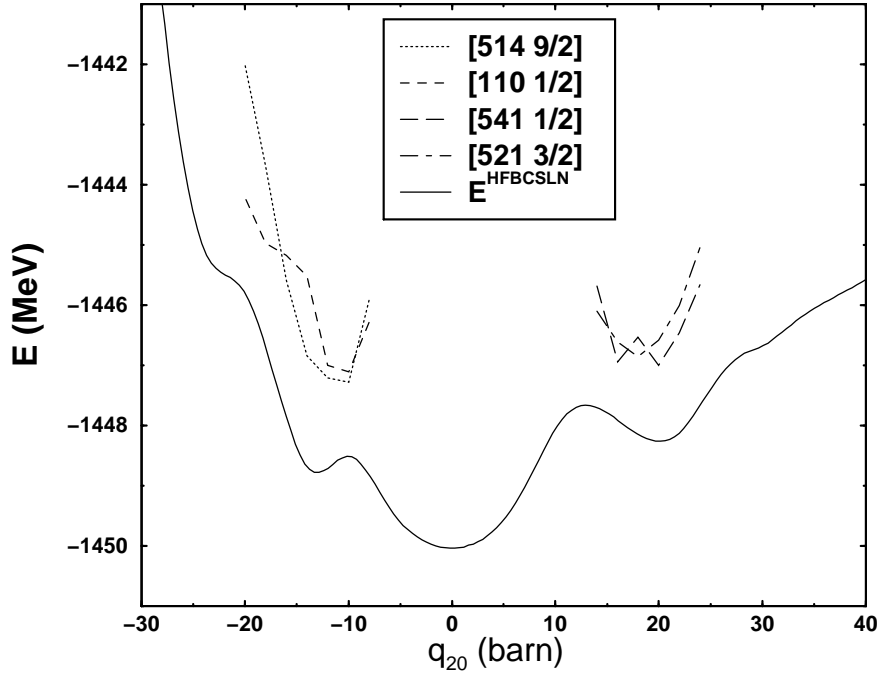


FIG. 16.3 – Énergies potentielles en fonction de la déformation quadrupolaire dans le ^{186}Pb pour les états HFBCSLN totalement appariés d'une part, et une sélection d'états à 2 qps protons invariants par renversement du temps d'autre part.

16.1.3 Corrélations quadrupolaires.

La GCM sur le moment quadrupolaire axial traite la dynamique quantique collective issue de l'image statique décrite dans la partie précédente. Il s'agit de coupler les configurations obtenues par le calcul de champ moyen contraint via l'interaction définie par la formule 15.18. La nouvelle fonction d'essai s'écrit :

$$|\Psi_k\rangle = \sum_{q_{20}=-40\,b}^{+50\,b} f_{q_{20}}^k |\Phi(q_{20})\rangle \quad . \quad (16.2)$$

Les états de champ moyen contraints $|\Phi(q_{20})\rangle$ sur lesquels la fonction d'essai est développée ne possèdent pas le bon nombre de nucléons. De fait, la méthode rappelée dans la section 12.1 permettant d'assurer le bon nombre moyen de nucléons dans les états collectifs est utilisée. D'autre part, les états de base $|\Phi(q_{20})\rangle$ ont été calculés avec un certain pas en q_{20} . Le choix a consisté à prendre un pas de 4 barn, à la fois assez fin pour que le spectre de basse énergie puisse être assimilé à celui obtenu dans une limite (fictive) continue [172] et assez grand pour que la matrice de norme constituée des éléments de matrice :

$$\mathcal{I}(q'_{20}, q_{20}) = \langle \Phi(q'_{20}) | \Phi(q_{20}) \rangle \quad , \quad (16.3)$$

ne soit pas fortement singulière [40, 172]. En effet, la redondance associée à la non-orthogonalité des états de base $|\Phi(q_{20})\rangle$ fait de la valeur 0 un point d'accumulation dans le spectre de cette matrice. Ayant besoin de calculer la matrice $\mathcal{I}^{-1/2}$ pour définir les opérateurs $\tilde{\mathcal{H}}$, $\Delta\tilde{\mathcal{N}}$ et $\Delta\tilde{\mathcal{Z}}$ utilisés dans l'Eq. 12.11, l'instabilité des calculs associée aux valeurs propres proches de 0 doit être limitée par le choix d'un pas assez grand et l'extraction de ces valeurs propres parasites.

Les éléments de matrice de couplage entrant dans la matrice GCM sont définis par :

$$\mathcal{H}(q'_{20}, q_{20}, X) = \langle \Phi(q'_{20}) | \left[t + v_{Skyrme}^{(q'_{20}, q_{20})}(X) \right] | \Phi(q_{20}) \rangle, \quad (16.4)$$

et dépendent explicitement du paramètre X . La variation de ces éléments de matrice non-diagonaux avec X :

$$\mathcal{H}(q'_{20}, q_{20}, X) - \mathcal{H}(q'_{20}, q_{20}, 0), \quad (16.5)$$

est donnée pour $X = -0.5$ et $X = 0.5$ sur la Fig. 16.4, et cela pour $q'_{20} = -14b$, $q'_{20} = 0b$ et $q'_{20} = 20b$, q_{20} étant variable. Ces quantités donnent une indication de l'influence du choix de la dépendance en densité sur le couplage entre un minimum local et les autres configurations statiques. Le cas $X = 0$ est pris comme référence puisque ce choix correspond à celui fait jusqu'à ce jour dans les calculs de GCM. Nous constatons que le choix de la dépendance en densité joue sur une échelle de déformation typique de l'ordre de $\pm 10b$ autour du point d'ancrage d'un élément de matrice, les couplages étant quasiment nuls au-delà en raison des contractions non-diagonales de Wick. Les variations constatées (≈ -1 MeV) de ces éléments de matrice sont de l'ordre du pour mille. Comme attendu, les éléments diagonaux $\mathcal{H}(q_{20}, q_{20}, X)$ ne varient pas avec X puisque le hamiltonien de champ moyen ne dépend pas de ce paramètre.

Ces variations vont globalement dans le sens d'un couplage plus attractif lorsque X croît. Cela est vrai autour du minimum sphérique qui se trouve plus fortement couplé aux configurations statiques de déformation $-10b < q_{20} < +10b$ lorsque X augmente. On peut donc s'attendre à des corrélations quadrupolaires accrues dans le fondamental et à un étalement plus important de la fonction d'onde collective dans ce cas. Pour les minima oblate et prolata, la variation du paramètre X a un effet moins trivial puisque la différence 16.5 change signe au passage de $q'_{20} = q_{20}$ pour les deux minima locaux. Le minimum oblate est couplé de manière plus attractive avec les configurations de déformation plus grande et moins attractive avec les configurations moins déformées pour $X \geq 0$. Le minimum prolata est d'avantage couplé aux états dans la barrière qui le sépare du minimum sphérique et moins couplé aux états ayant une déformation prolata plus importante. La situation est inversée pour $X \leq 0$. Une conclusion étant toujours difficile à tirer de l'étude de quelques éléments de matrice de couplage, nous procédons maintenant à la diagonalisation de la matrice GCM pour les trois valeurs du paramètre X .

Concernant les énergies absolues, les valeurs données dans le tableau 16.1 corroborent l'analyse faite au niveau des éléments de matrice de couplage. L'énergie de corrélation dans l'état fondamental engendrée par les vibrations quadrupolaires croît avec X . Notons

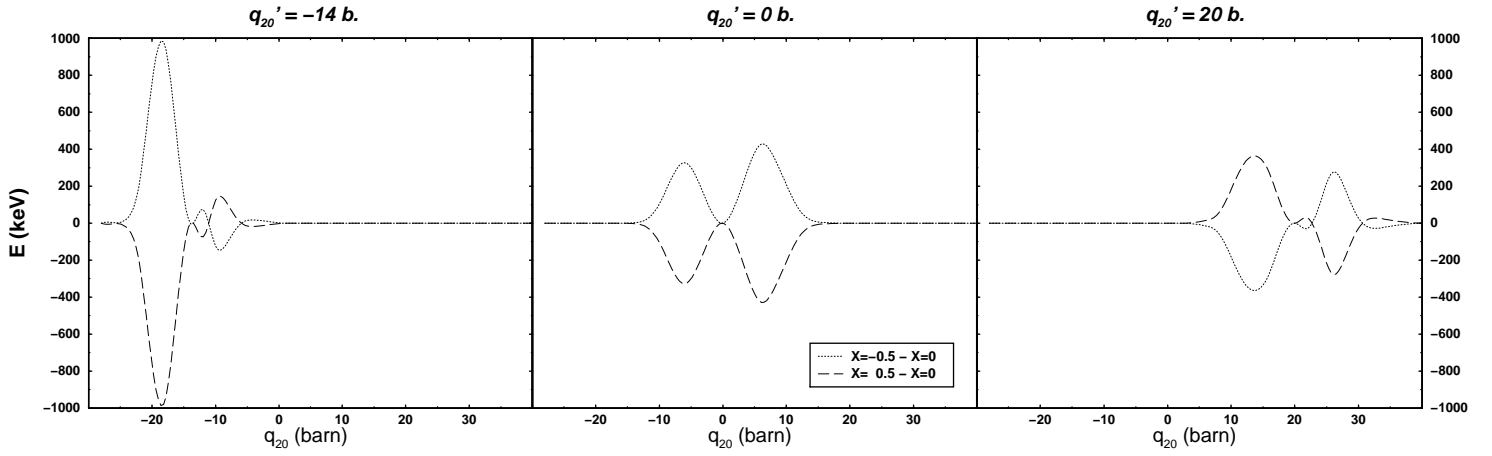


FIG. 16.4 – Différence entre les éléments de matrice de couplage 16.4 obtenus pour $X = -0.5$ et $X = 0$ d'une part, et pour $X = 0.5$ et $X = 0$ d'autre part. Ces éléments de matrice sont tels que la déformation q'_{20} du bra est fixée à $-14b$ sur la figure de gauche, $0b$ sur la figure du centre et $+20b$ sur la figure de droite, tandis que la déformation q_{20} du ket est variable.

que ce résultat n'est pas un argument en faveur des grandes valeurs de X puisque l'énergie obtenue par la GCM n'est en rien reliée au principe variationnel de Ritz comme cela a été discuté dans la section 13.5.

TAB. 16.1 – Energie de corrélation (keV) dans l'état fondamental associée à la GCM sur le moment quadrupolaire axial en fonction du choix de dépendance en densité dans le hamiltonien.

GCM simple	$X = -0.5$	$X = 0$	$X = 0.5$
$\mathcal{E}_0^{GCM}(X) - \mathcal{E}^{HFBCSLN}(q_{20} = 0)$	-576	-915	-1302

La Fig. 16.5 donne les énergies d'excitation et les déformations intrinsèques moyennes des cinq premiers états collectifs pour les trois valeurs de X considérées. Sur cette figure, les quantités sont renormalisées de telle sorte que les énergies des fondamentaux collectifs coïncident dans les trois cas. La courbe d'énergie potentielle HFBCSLN est tracée pour guider l'œil.

Tout d'abord, il faut relever l'influence notable du choix de la densité sur les énergies et les déformations des états collectifs obtenus. Ainsi, l'énergie d'excitation de certains états varie du simple au double lorsque X parcourt l'intervalle $[-0.5, 0.5]$. Les énergies

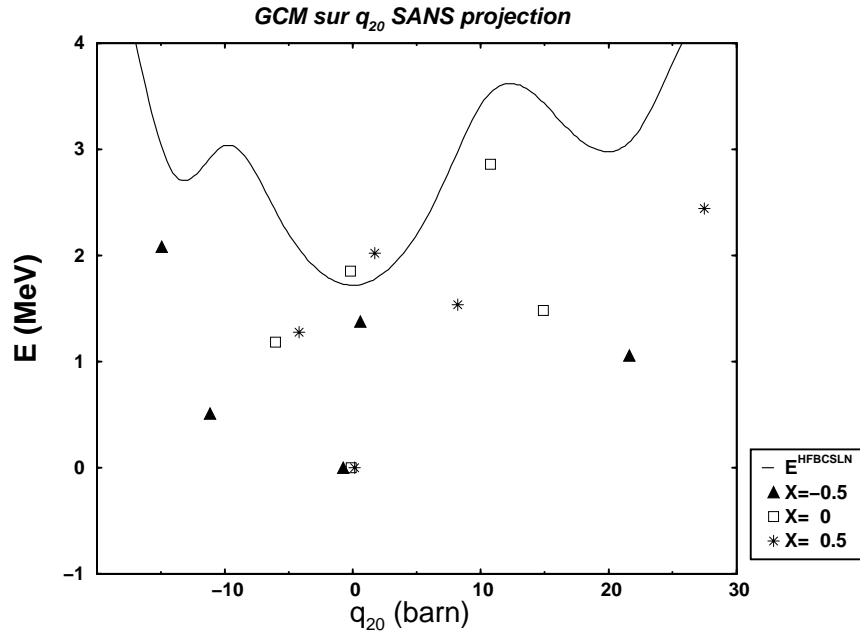


FIG. 16.5 – Spectre d'excitation des états collectifs quadrupolaires pour $X = -0.5$, $X = 0$ et $X = 0.5$. Les quantités sont renormalisées de telle sorte que l'énergie des fondamentaux collectifs coïncide pour les trois valeurs de X . La courbe d'énergie potentielle HFBCSLN est tracée pour guider l'œil.

d'excitations des trois premiers états excités diminuent lorsque X décroît, tandis que celle du quatrième état augmente avant de baisser significativement pour $X = -0.5$. Une diminution de X par rapport au cas standard tend donc à améliorer l'accord entre l'énergie des deux premiers états excités et la position des deux isomères de forme vus expérimentalement. Comme le montre la partie gauche de la Fig. 16.6, l'état oblate est sur l'expérience pour $X = -0.5$, tandis que l'état prolate est encore nettement trop haut bien qu'il se soit également rapproché de la valeur expérimentale par rapport au cas standard $X = 0$. La position relative des deux états est en accord avec l'attribution expérimentale pour toutes les valeurs du paramètre X [200]. Notons également que c'est seulement pour $X \leq -0.3$ que l'énergie d'excitation de ces deux premiers états excités est diminuée par l'inclusion des corrélations vibrationnelles quadrupolaires.

Dans le cas présent, les fonctions d'onde collectives s'écrivent sous la forme :

$$g_{q'_{20}}^k = \sum_{q_{20}} \mathcal{I}^{1/2}(q'_{20}, q_{20}) f_{q_{20}}^k \quad . \quad (16.6)$$

La Fig. 16.7 donne les fonctions d'onde collectives des cinq premiers états vibrationnels pour les trois choix de densité. Il apparaît que celles-ci sont de plus en plus localisées à mesure que X devient négatif. Par exemple, l'étalement de la fonction d'onde du fondamental sur le chemin de contrainte quadrupolaire est beaucoup plus faible pour $X = -0.5$ que pour $X = 0$ et $X = 0.5$. De la même manière, les premiers états oblate et prolate sont mieux localisés dans leur puits respectif pour une valeur négative de ce paramètre.

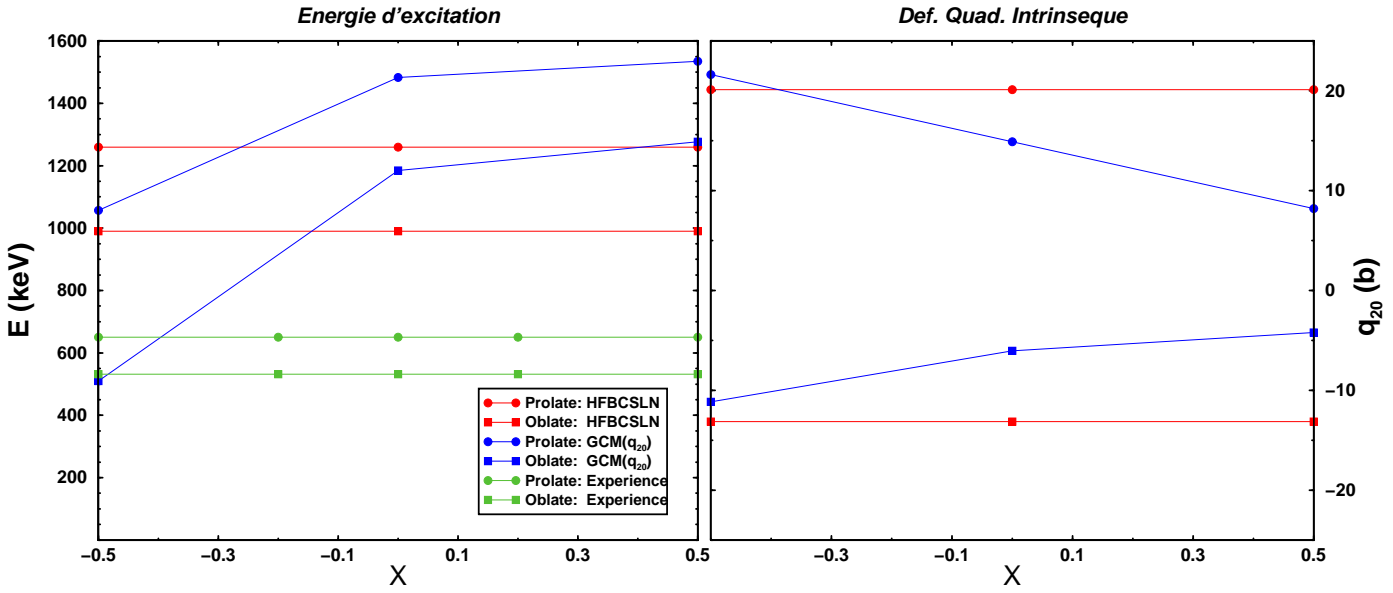


FIG. 16.6 – Gauche : énergies d'excitation des deux premiers états en fonction du paramètre X . Droite : déformation intrinsèque moyenne de ces états.

Ce résultat peut se comprendre assez directement à partir des éléments de matrice de couplage discutés sur la Fig. 16.4. En restant très qualitatif, on constate par exemple que le caractère moins attractif des couplages entre les configurations du puits prolate et celles de plus faibles déformations quadrupolaires pour $X = -0.5$ rend le premier état prolate essentiellement concentré autour de $q_{20} = 20b$ et annule quasiment ses composantes dans les puits sphérique et oblate.

L'évolution de la déformation intrinsèque moyenne des états découle du changement de structure des fonctions d'onde comme le montrent la Fig. 16.5 et la partie droite de la Fig. 16.6. Ainsi, les déformations des premiers états oblate et prolate sont très proches de la position des minima statiques pour $X = -0.5$ tandis que la collectivité très importante obtenue pour $X \geq 0$ tend à interdire l'attribution d'un caractère oblate ou prolate bien défini à ces états.

L'analyse qui vient d'être menée tend à montrer que la définition plus rigoureuse de la dépendance en densité de la force proposée ici autorise une meilleure description des propriétés de coexistence de formes dans le ^{186}Pb , à condition de prendre une valeur négative du paramètre X pour procéder à la GCM sur le moment quadrupolaire. Au-delà de la signification physique d'un tel choix sur laquelle nous reviendrons plus tard, cette conclusion doit malgré tout être tempérée au niveau où nous nous trouvons pour l'instant.

En effet, tandis que l'énergie de l'état $k = 1$ a été comparée à celle de l'état "oblate" 0^+ expérimental, sa fonction d'onde $g_{q_{20}}^1$ possède la structure d'une fonction à un phonon quadrupolaire pour $X = 0.5$ et $X = 0$ et à deux phonons pour $X = -0.5$, ce qui rend difficile l'attribution claire d'un spin 0^+ pour cet état. L'état à deux nœuds $k = 2$ semble être la reminiscence d'un état à deux phonons, ce qui rend plus facile l'attribution d'une composante significative de spin 0^+ . Au-delà du spin, l'analyse des états excités en terme

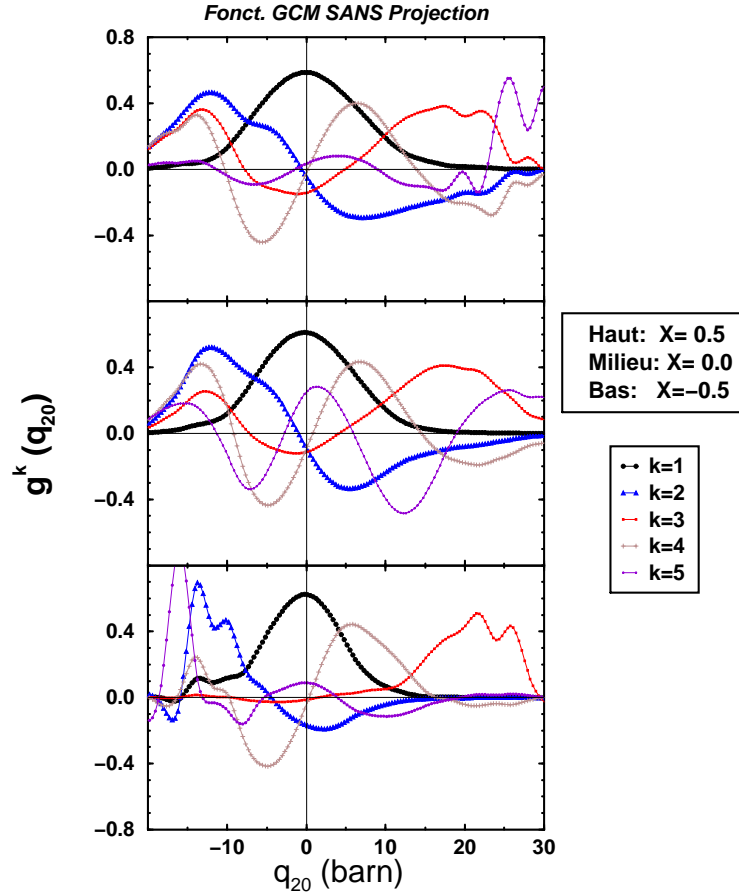


FIG. 16.7 – Fonctions d'onde collectives $g_{q_{20}}^k$ issues de la GCM sur le moment quadrupolaire axial tracées en fonction de q_{20} pour les trois valeurs de X .

de structure oblate ou prolata est compliquée pour $X \geq 0$ en raison de leur étalement dans les trois puits de potentiel. Ces dernières remarques traduisent la nécessité d'une projection sur le moment angulaire pour obtenir une comparaison plus pertinente avec les données expérimentales.

Le tableau 16.2 compare les résultats de la GCM obtenus pour $X = 0$ à ceux obtenus avec la paramétrisation SIII et une force d'appariement à gap constant [56] ainsi qu'à ceux obtenus avec la force de Gogny [57]. Nous avons choisi de limiter la comparaison de nos calculs à ceux réalisés selon le même type de méthode. Notons que la densité utilisée dans ces calculs est la densité mixte, ce qui correspond au cas $X = 0$ dans notre définition. Nous avons sélectionné dans la Ref. [56] le cas où la force d'appariement à gap constant est telle que l'écart minimum entre les courbes à 0 et 2 qps construites sur la paire [541 9/2] est égal à 700 keV puisque de meilleurs résultats relativement aux propriétés de coexistence de forme sont ainsi obtenus.

Avec la force de Skyrme SIII et la force d'appariement à gap constant, des résultats relativement semblables aux nôtres sont obtenus. Le premier état excité est plus localisé dans le puit oblate et son énergie est en meilleur accord avec l'expérience, à savoir 200 keV en dessous de l'énergie trouvée ici. Ce calcul bénéficie cependant d'une réduction ad hoc un peu trop importante de la force schématique d'appariement à la vue des résultats obtenus avec notre force réaliste (voir section 16.1.2). Le premier état prolata est tout à

fait similaire au notre, les troisième et quatrième états excités sont trouvés à la même déformation que dans nos calculs, mais à des énergies d'excitation nettement supérieures. Cela est dû au caractère schématique de la force à gap constant qui est inadaptée pour le calcul des configurations de grande déformation qui interviennent d'autant plus que l'état collectif est excité. D'une manière générale les fonctions collectives associées sont, comme dans nos calculs pour $X = 0$, relativement étalées sur le chemin de déformation et souffrent de la même incertitude quant à leur contenu en spin.

TAB. 16.2 – Déformation moyenne q_{20} (barn) et énergie d'excitation $\Delta\mathcal{E}$ (keV) des états vibrationnels quadrupolaires obtenus pour $X = 0$ dans la présente étude, avec la force de Skyrme SIII et une force d'appariement à gap constant [56], et avec la force de Gogny [57]. Sont également donnés les résultats incluant les effets adiabatiques induits par la paire intruse [541 9/2].

GCM $X = 0$	SLy4 + $V^{p-p}(\vec{R}, \vec{r})$		SIII + Δ		Gogny		SIII + Δ + Effets diab.	
	q_{20}	$\Delta\mathcal{E}$	q_{20}	$\Delta\mathcal{E}$	q_{20}	$\Delta\mathcal{E}$	q_{20}	$\Delta\mathcal{E}$
k=0	-0.2	0	-1.2	0	+0.4	0	-1.2	0
k=1	-6.0	1185	-9.8	900	+20	983	-10	876
k=2	+15	1483	+19	1500	-11	1441	+18	1500
k=3	-0.2	1853	+3.0	2200	-	-	-2.0	1850
k=4	+11	2861	+12	3300	-	-	+1.0	2800

Dans le tableau 16.2 sont également donnés les résultats des calculs incluant les effets adiabatiques associés au couplage entre les états à 0 qp et les états à 2 qps construits sur la paire proton intruse [541 9/2] [56]. Les effets adiabatiques entraînent une localisation plus importante du premier état excité dans le puit oblate et une diminution très légère de son énergie d'excitation. Le second état excité n'est pas modifié par l'inclusion des effets adiabatiques. Le troisième l'est assez nettement, puisqu'il possède la même énergie que notre état $k = 3$. Il en est de même pour l'énergie de l'état $k = 4$. L'inclusion des effets adiabatiques semble donc corriger certaines insuffisances de la force d'appariement à gap constant d'une part, mais également devoir avoir une influence sur les propriétés de l'état oblate quelle que soit la force utilisée. Ainsi, si l'on voulait d'hors et déjà se risquer au choix du paramètre X dans nos calcul, une valeur légèrement supérieure à -0.5 semblerait

la plus adaptée afin de laisser les effets diabatiques abaisser l'énergie théorique jusqu'à la valeur expérimentale.

Avec la force de Gogny, le premier état excité est à 983 keV au dessus du fondamental, soit à la même énergie que dans le calcul de la Ref. [56]. En revanche, cet état est prolate. Cette différence est la conséquence de l'inversion de la position des minima locaux dans la courbe d'énergie potentielle de champ moyen pour cette force par rapport à nos calculs. Cela constitue également une inversion par rapport aux résultats expérimentaux [200]. Le second état excité (oblate) est lui à la même énergie que notre état prolate $k = 2$. Les trois états collectifs trouvés avec la force de Gogny sont bien localisés dans les puits respectivement sphérique, prolate et oblate, mais de nouveau l'état oblate ne possède pas la structure d'un vide de phonon auquel on pourrait aisément attribuer un spin 0^+ . Au regard de ces résultats, il semble que la force de Skyrme ait tendance à coupler plus fortement les configurations statiques et à augmenter la collectivité des fonctions GCM par rapport à la force de Gogny lorsque la même densité est utilisée dans le canal p-t.

Finalement cette comparaison met en lumière la sensibilité du phénomène de coexistence de forme vis à vis des détails du modèle, notamment vis à vis des caractéristiques de la force dans les canaux p-t et p-p.

16.1.4 Effet de la projection sur le nombre de nucléons.

Nous incluons à présent la restauration du bon nombre de neutrons et de protons dans les fonctions d'onde statiques et collectives afin d'en étudier l'impact sur les propriétés de coexistence de forme dans le ^{186}Pb en fonction de X . Étant donnée l'importance du traitement de l'appariement dans ce système, on peut penser que cette restauration de symétrie va influencer significativement les observables.

Nous commençons par étudier l'effet de cette projection sur la courbe d'énergie potentielle le long du chemin de contrainte quadrupolaire. La figure 16.8 donne les courbes d'énergie potentielle projetée pour les trois choix de densité. L'effet de la projection est significatif et dépend de ce choix. Le gain moyen en énergie associé à cette projection est de l'ordre de 2 MeV. Autour de cette moyenne, les variations sont plus ou moins significatives selon la valeur de X , selon le minima, mais surtout selon que l'on considère un minimum ou un maximum local.

Comme le montre la première ligne du tableau 16.3, l'énergie de corrélation associée à la projection diminue lorsque X augmente. Cette tendance est à l'opposé de celle obtenue pour l'énergie de corrélation quadrupolaire dans les calculs de GCM. De son côté, l'énergie d'excitation du minimum local oblate passe de 1353 keV au niveau HFBCSLN à 1020 keV pour $X = -0.5$, 1190 keV pour $X = 0$ et 1090 keV pour $X = 0.5$. De même, l'énergie d'excitation du minimum prolate passe de 1778 keV au niveau HFBCSLN à 950 keV pour $X = -0.5$, 1060 keV pour $X = 0$ et 1160 keV pour $X = 0.5$. L'évolution opposée de l'effet de la projection sur l'énergie d'excitation des deux minima en fonction de X est telle qu'une inversion de leur position respective par rapport à la courbe HFBCSLN se produit pour $X = -0.5$ et $X = 0$. Les deux courbes d'énergie potentielle correspondantes ressemblent à celle obtenue avec l'interaction de Gogny au niveau du champ moyen [57].

La projection sur le nombre de particules a également pour effet de creuser un minimum local au voisinage de $q_{20} = 30b$, là où une simple inflexion était visible sur la courbe

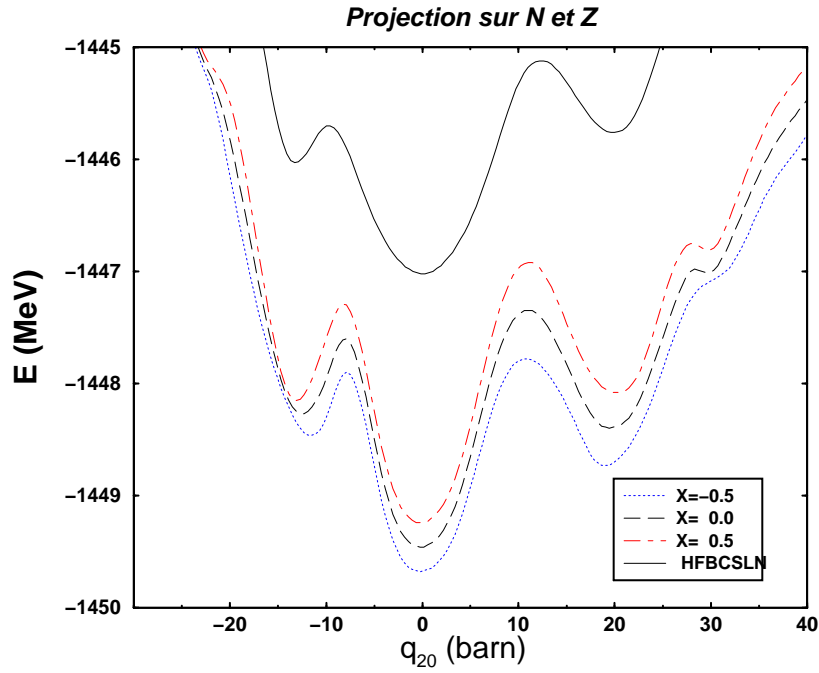


FIG. 16.8 – Énergie potentielle de champ moyen et énergie potentielle projetée pour trois choix de la dépendance en densité dans les éléments de matrice non-diagonaux (choix de X , voir texte) en fonction de la déformation quadrupolaire.

HFBCSLN. Cela devrait se faire sentir sur les troisième et quatrième états vibrationnels qui étaient déjà influencés par ce minimum sous-jacent en l'absence de projection.

Enfin, la projection augmente nettement la hauteur des barrières séparant les différents puits. La barrière qui sépare le minimum oblate du point sphérique est ainsi multipliée par 2.8 pour $X = -0.5$, 3.3 pour $X = 0$ et 4.3 pour $X = 0.5$, tandis que celle séparant le minimum prolate du point sphérique est multipliée par 1.7 pour $X = -0.5$, 1.9 pour $X = 0$ et 2.1 pour $X = 0.5$.

Ces résultats montrent que la projection sur le nombre de particules est particulièrement importante du point de vue des propriétés de coexistence de formes dans le ^{186}Pb . Cependant, le choix d'une valeur optimale pour le paramètre X est difficile à établir dans ce contexte puisque l'énergie d'excitation des deux minima évoluent en sens inverses et qu'aucune valeur ne permet d'optimiser les deux à la fois.

Dans ce contexte, le choix de densité correspondant à $X = 0.5$ semble le plus adapté pour reproduire les propriétés des deux états 0^+ expérimentaux. Non seulement l'énergie d'excitation des minima oblate et prolate est abaissée de manière significative tout en conservant la position relative compatible avec l'expérience, mais les barrières séparant ces minima sont maximales pour cette valeur de X . Ces caractéristiques devraient permettre un abaissement de l'énergie des isomères de forme ainsi qu'une localisation plus importante des fonction d'onde collectives dans les puits de potentiel. Pour tester ces conjectures, nous présentons maintenant les résultats incorporant les corrélations vibrationnelles quadrupolaires. Cela est rendu possible par un calcul GCM utilisant les fonc-

tions contraintes projetées sur N et Z comme fonctions de base (voir section 12.4). Les nouvelles fonctions d'essai s'écrivent :

$$|\Psi_k^{N,Z}\rangle = \sum_{q_{20}=-40b}^{+50b} f_{q_{20},N,Z}^k \hat{P}_N \hat{P}_Z |\Phi(q_{20})\rangle \quad . \quad (16.7)$$

L'écriture des éléments de la matrice GCM nécessite le développement des opérateurs de projection \hat{P}_N et \hat{P}_Z dans chaque terme de la combinaison linéaire 16.7 puisque l'interaction dépend de la déformation respective mais aussi de l'orientation dans l'espace de jauge des fonctions produit mélangées. Ainsi, l'élément de couplage entre deux fonctions contraintes projetées s'écrira :

$$\mathcal{H}^{N,Z}(q'_{20}, q_{20}, X) = \sum_{a,b} F_{a,b}^{N,Z} \langle \Phi(q'_{20}) | \left[t + v_{Skymc}^{(q'_{20}, q_{20}, a, b)}(X) \right] e^{i\pi a \hat{N}/n} e^{i\pi b \hat{Z}/m} | \Phi(q_{20}) \rangle \quad , \quad (16.8)$$

où la somme sur (a, b) va de $(-n, -m)$ à (n, m) par valeurs entières, et où :

$$F_{c,c'}^{N,Z} = \frac{e^{-i\pi a N/n}}{2n} \frac{e^{-i\pi b Z/m}}{2m} \quad . \quad (16.9)$$

La Fig. 16.9 donne les différences entre les éléments de matrice non-diagonaux :

$$\mathcal{H}^{N,Z}(q'_{20}, q_{20}, X) - \mathcal{H}^{N,Z}(q'_{20}, q_{20}, 0) \quad , \quad (16.10)$$

avec $X = -0.5$ et $X = 0.5$ pour $q'_{20} = -14b$, $q'_{20} = 0b$ et $q'_{20} = 20b$ en fonction de q_{20} . Le choix de la dépendance en densité joue pour un même intervalle de déformation que dans le cas sans projection. Plusieurs éléments diffèrent cependant. En premier lieu, les éléments diagonaux $\mathcal{H}^{N,Z}(q_{20}, q_{20}, X)$ ne sont pas constants avec X puisqu'ils incluent déjà la projection sur le bon nombre de particules dont l'effet dépend de la valeur de X comme cela vient d'être discuté. Les différences 16.10 pour $q'_{20} = q_{20}$ reflètent ainsi l'écart entre les courbes projetées de la Fig 16.8.

Dès lors que l'on s'éloigne de quelques barns de la diagonale, le signe de cette différence devient systématiquement différent de celui obtenu pour $q'_{20} = q_{20}$. Cela signifie que plus l'effet de la projection sur le nombre de nucléons est important ($\leftrightarrow X$ petit), moins les couplages entre les configurations de déformations quadrupolaires différentes est attractif. L'évolution des couplages avec X est donc globalement la même que dans le cas sans projection. De nouveau, la collectivité quadrupolaire dans le fondamental devrait augmenter avec X . Concernant les minima oblate et prolata, les éléments de matrice présentent maintenant un comportement symétrique autour de leur point d'ancrage. Cela devrait modifier significativement les propriétés des états collectifs et aller à l'encontre d'une meilleure localisation de l'état oblate pour X grand comme nous pouvions l'espérer au vu des valeurs diagonales données sur la Fig. 16.8.

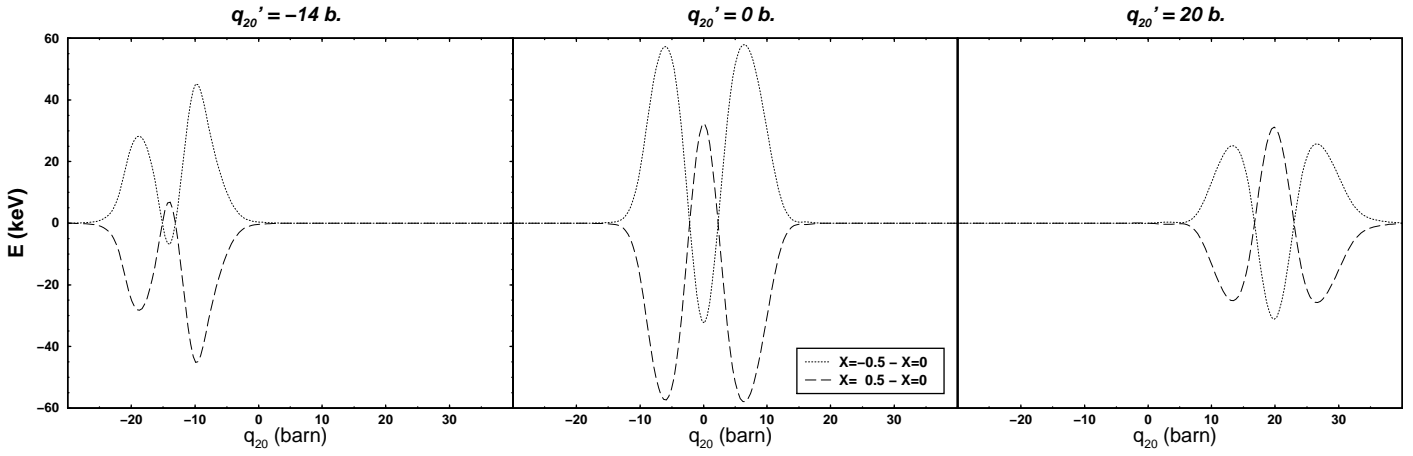


FIG. 16.9 – Mêmes quantités que sur la Fig 16.4 pour un ket et un bra projetés sur le bon nombre de neutrons et de protons.

Procédons maintenant à la diagonalisation de la matrice GCM pour les trois valeurs du paramètre X . Les valeurs de l'énergie de liaison de l'état fondamental données dans le tableau 16.3 corroborent l'analyse réalisée au niveau des éléments de matrice de couplage. De nouveau, l'énergie de corrélation associée au degré de liberté vibrationnel quadrupolaire est croissante avec X . La seconde ligne du tableau montre que celle-ci est quasiment la même que dans le cas où la projection sur N et Z n'était pas prise en compte. Cumulant l'effet des deux mélanges de configurations, et malgré la tendance inverse pour la projection, l'énergie de corrélation totale dans le fondamental augmente avec X .

Comme le montre la Fig. 16.10, l'effet des corrélations quadrupolaires sur l'énergie d'excitation et la déformation moyenne des deux premiers états collectifs dépend moins du choix du paramètre X que dans le cas sans projection. L'inverse est vrai pour les deux états suivants. L'énergie d'excitation des deux états les plus bas se rapproche des valeurs expérimentales lorsque X décroît. Nous retrouvons la tendance constatée dans le cas sans projection même si dans le cas présent les deux états restent bien trop haut en énergie. Il est à noter que la seule projection sur N et Z inversait cette tendance pour le minimum oblate comme le rappelle la Fig. 16.11. Enfin, l'inclusion des corrélations quadrupolaires ne rétablit pas la position relative expérimentale des états oblate et prolate les plus bas. Au final, la projection sur le nombre de particules rajoutée à la GCM sur la déformation quadrupolaire influence notablement les propriétés de l'état prolate pour $X \geq 0$, mais modifie plus dramatiquement les propriétés de l'état oblate quelle que soit le choix de densité.

En ce qui concerne la déformation moyenne, le choix du paramètre X n'est de nouveau pas crucial et les deux premiers états semblent posséder des caractères respectifs prolate et oblate bien définis quelle que soit la valeur du paramètre comme le montre la partie droite de la Fig. 16.11.

En raison de la projection sur le bon nombre de nucléons, les fonctions collectives orthogonalisées sont re-définies par :

TAB. 16.3 – Energie de corrélation (keV) pour le minimum sphérique issue de la projection sur le nombre de particules. Energie de corrélation additionnelle dans le fondamental associée aux vibrations quadrupolaires.

GCM + Proj N,Z	$X = -0.5$	$X = 0$	$X = 0.5$
$\mathcal{E}^{N,Z}(q_{20} = 0, X) - \mathcal{E}^{HFBCSLN}(q_{20} = 0)$	-2655	-2436	-2218
$\mathcal{E}_0^{GCM,N,Z}(X) - \mathcal{E}^{N,Z}(q_{20} = 0, X)$	-305	-754	-1248
$\mathcal{E}_0^{GCM,N,Z}(X) - \mathcal{E}^{HFBCSLN}(q_{20} = 0)$	-2960	-3197	-3471

$$g_{q_{20},N,Z}^k = \sum_{q_{20}} \mathcal{I}_{N,Z}^{1/2}(q'_{20}, q_{20}) f_{q_{20},N,Z}^k \quad , \quad (16.11)$$

où

$$\mathcal{I}_{N,Z}(q'_{20}, q_{20}) = \langle \Phi(q'_{20}) | \hat{P}_N \hat{P}_Z | \Phi(q_{20}) \rangle \quad . \quad (16.12)$$

Les fonctions d'onde des cinq premiers états collectifs sont données sur la Fig. 16.12 pour les trois valeurs du paramètre X . La fonction $g_{q_{20},N,Z}^0$ de l'état fondamental s'élargit avec X du fait du couplage plus attractif entre le minimum absolu sphérique et les configurations de faible déformation prolata et oblate. La tendance pour les états excités est la même que dans le cas sans projection puisque les fonctions d'onde collectives sont de plus en plus localisées à mesure que X décroît. Cela est peut-être moins vrai pour l'état oblate qui développe une composante importante dans le puit sphérique lorsque X varie dans cette direction. Notons que cet état possède maintenant la structure d'un état à deux phonons pour les trois choix de densité. Enfin, les troisième et quatrième états excités développent une collectivité dans le puit à $q_{20} = 30b$ d'autant plus importante que X augmente en accord avec les courbes d'énergie potentielle projetée.

Notons que les résultats de la GCM obtenus pour $X = 0$ avec la projection sur N et Z (énergies d'excitation, déformations moyennes et fonctions d'onde collectives des trois premiers états) sont très semblables à ceux obtenus avec la force de Gogny dans la GCM simple. Comme cela a été mentionné, cette similitude existe déjà au niveau de la courbe d'énergie potentielle projetée obtenue ici et de la courbe d'énergie potentielle de champ moyen calculée avec la force de Gogny [57]. Il serait intéressant de se pencher plus en détails sur ce point afin de déterminer si cela est une qualité systématique de la force de Gogny dans le canal d'appariement.

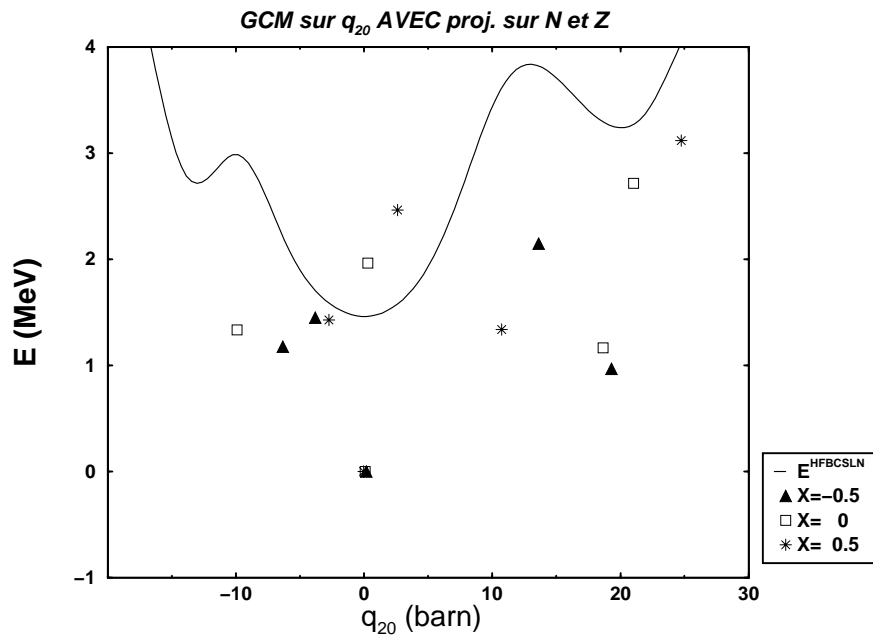


FIG. 16.10 – Mêmes quantités que sur la Fig 16.5 pour un mélange de configurations incluant à la fois les corrélations vibrationnelles quadrupolaires et les corrélations liées à la restauration du bon nombre de nucléons dans la fonction d'onde.

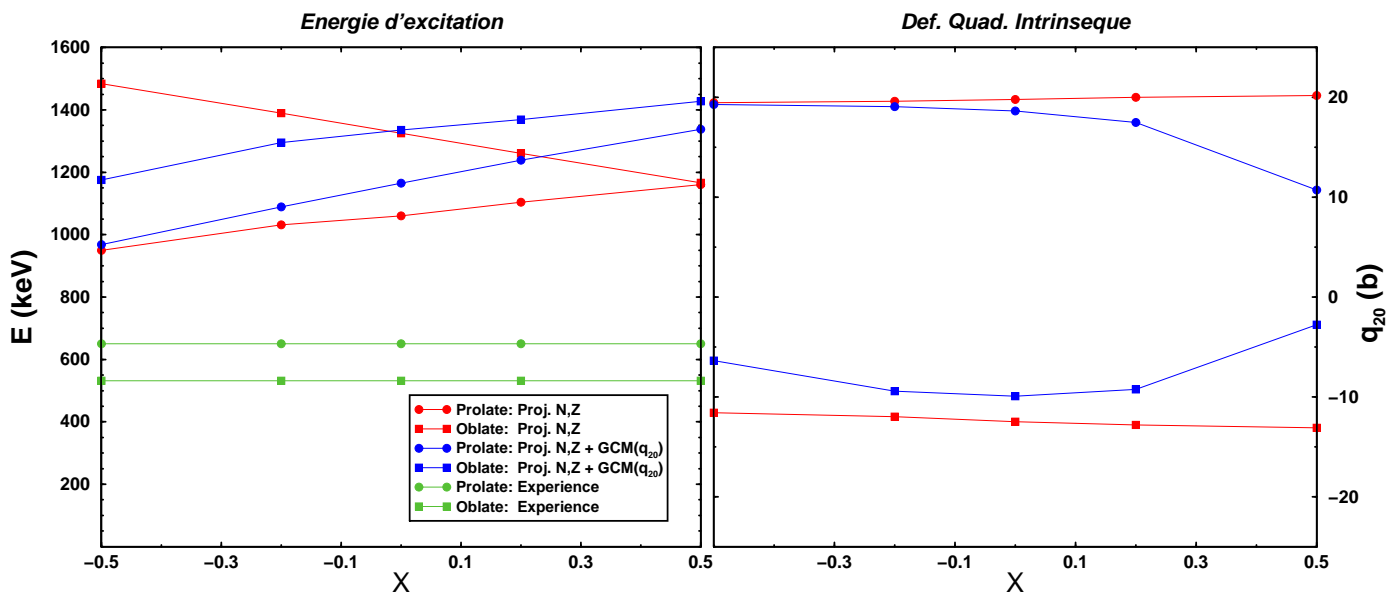


FIG. 16.11 – Gauche : énergies d'excitation des deux premiers états en fonction du paramètre X . Droite : déformation intrinsèque moyenne de ces états.

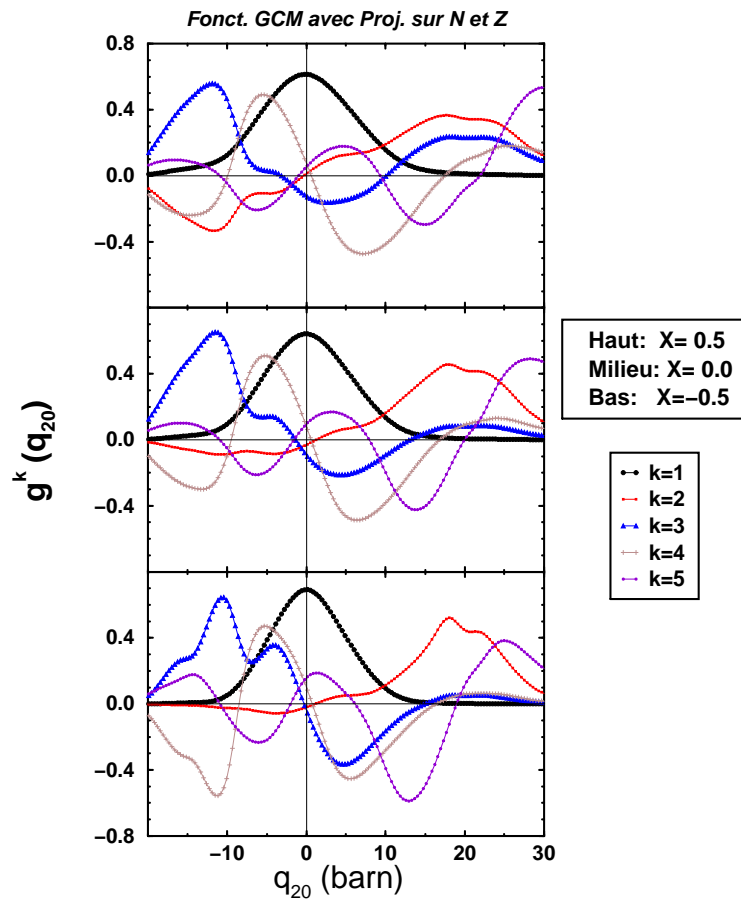


FIG. 16.12 – Fonctions d’onde collectives incluant à la fois les corrélations vibrationnelles quadrupolaires et les corrélations liées à la restauration du bon nombre de nucléons.

À ce stade de l'analyse nous pourrions de nouveau tenter de statuer quant à l'influence combinée du choix de la dépendance en densité et des mélanges de configurations incorporés dans le calcul pour reproduire les propriétés de structure du ^{186}Pb . Cela dit, la discussion est toujours entachée par le fait que les états collectifs brisent la symétrie de rotation et ne possèdent pas un bon spin. Afin d'obtenir une comparaison pertinente avec l'expérience, nous allons maintenant incorporer la projection sur le moment angulaire au traitement théorique.

16.1.5 Effet de la projection sur le moment angulaire.

Nous commençons par étudier l'effet de cette projection sur la courbe d'énergie potentielle le long du chemin de contrainte quadrupolaire. La figure 16.13 donne les courbes d'énergie projetée sur N , Z et $I^\pi = 0^+$ pour les trois choix de densité. La déformation donnée en abscisse rappelle de quel état intrinsèque les états de spin nul sont obtenus par projection. C'est en ce sens que nous parlerons de déformation dans cette section, les états projetés sur le spin $I^\pi = 0^+$ étant bien évidemment sphériques dans le repère du laboratoire.

Au vu de cette figure, il apparaît que la restauration du moment angulaire a un effet important sur les courbes d'énergie potentielle. D'un point de vue général, l'effet de la projection est nul au point sphérique et devient plus significatif à mesure que la déformation augmente. De ce fait, on observe l'apparition de deux minima absolus à des déformations voisines de $q_{20} = \pm 5b$ pour les trois choix de densité. Pour le reste, les caractéristiques des courbes d'énergie potentielle dépendent nettement du choix de densité dans le hamiltonien. Les corrélations associées à la projection sur le spin 0^+ augmentent avec X de telle sorte que l'ordre des courbes se trouve inversé par rapport au cas de la seule projection sur le bon nombre de particules. L'écart moyen entre les courbes obtenus pour $X = -0.5$ et $X = 0.5$ est finalement de 2 MeV environ. D'autre part, le choix $X = -0.5$ semble devoir favoriser la coexistence de formes, notamment pour l'état prolate, du fait de la position très basse des minima locaux pour ce choix de densité. En revanche, la profondeur du puit oblate diminue très nettement lorsque l'on va vers ces valeurs de X , ce qui rend la coexistence entre un état oblate et le fondamental sphérique plus improbable. Pour finir, notons que les projections sur N , Z et I positionnent le minimum prolate plus bas que le minimum oblate pour toutes les valeurs de X .

Sans aller plus loin dans l'analyse détaillée des courbes d'énergie potentielle projetée, nous incorporons maintenant les corrélations vibrationnelles quadrupolaires. Cela est possible grâce à un calcul GCM utilisant les fonctions contraintes projetées sur N , Z , I et $M = 0$ comme fonctions de base. Les nouvelles fonctions d'essai s'écrivent :

$$|\Psi_k^{N,Z,I}\rangle = \sum_{q_{20}=-40b}^{+50b} f_{q_{20},N,Z,I}^k \hat{P}_I \hat{P}_N \hat{P}_Z |\Phi(q_{20})\rangle \quad . \quad (16.13)$$

L'écriture des éléments de la matrice GCM nécessite le développement des opérateurs de projection dans chaque terme de la combinaison linéaire 16.13 puisque l'interaction dépend de la déformation, de l'orientation dans l'espace de jauge et dans l'espace réel

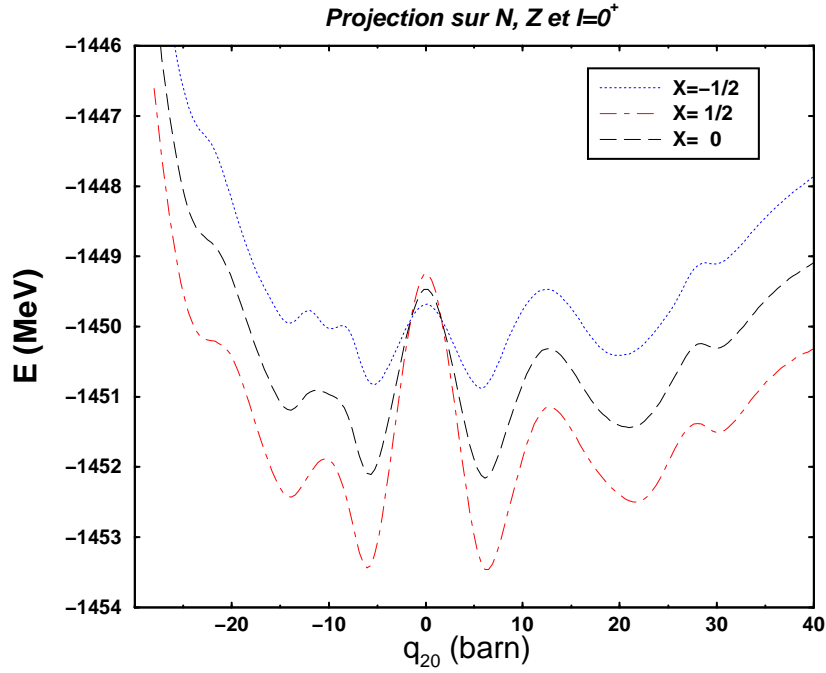


FIG. 16.13 – Énergie potentielle projetée sur N , Z et $I^\pi = 0^+$ pour les trois valeurs de X .

des fonctions produit mélangées. L'élément de couplage entre deux fonctions contraintes projetées s'écrit :

$$\mathcal{H}^{N,Z,I}(q'_{20}, q_{20}, X) = \sum_{a,b,c} F_{a,b,c}^{N,Z,I} \langle \Phi(q'_{20}) | \left[t + v_{Skyrme}^{(q'_{20}, q_{20}, a, b, c)}(X) \right] e^{i\pi c J_y/p} e^{i\pi a \hat{N}/n} e^{i\pi b \hat{Z}/m} | \Phi(q_{20}) \rangle \quad , \quad (16.14)$$

où la somme sur (a, b, c) va de $(-n, -m, -p)$ à (n, m, p) par valeurs entières, et où :

$$F_{a,b,c}^{N,Z,I} = \frac{(2I+1) \sin(\pi c/p) d_{00}^{I*}(\pi c/p)}{2p} \frac{e^{-i\pi a N/n}}{2n} \frac{e^{-i\pi b Z/m}}{2m} \quad . \quad (16.15)$$

La Fig. 16.14 donne les différences entre les éléments de matrice non-diagonaux :

$$\mathcal{H}^{N,Z,I}(q'_{20}, q_{20}, X) - \mathcal{H}^{N,Z,I}(q'_{20}, q_{20}, 0) \quad , \quad (16.16)$$

avec $X = -0.5$ et $X = 0.5$ pour $q'_{20} = -14 \text{ b}$, $q'_{20} = 0 \text{ b}$ et $q'_{20} = 20 \text{ b}$ en fonction de q_{20} . Le choix de la dépendance en densité joue pour un même intervalle de déformation que dans les deux calculs précédents. L'allure des couplages est identique à celle obtenue dans le cas où seule la projection sur le bon nombre de particules est prise en compte. La différence dans l'ordre de grandeur des couplages pour les trois figures n'est pas significative du fait du rôle joué par la norme des états couplés ; norme qui est très variable avec la déformation lorsque la projection sur I est prise en compte comme c'est le cas ici.

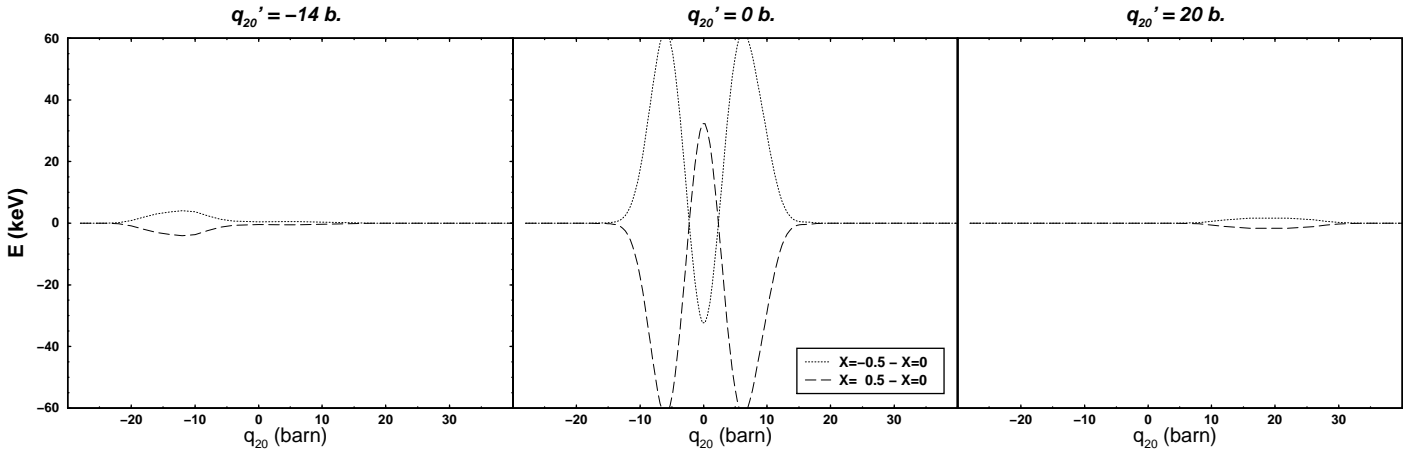


FIG. 16.14 – Mêmes quantités que sur la Fig 16.4 pour un ket et un bra projetés sur le bon nombre de neutrons et de protons.

Procédons maintenant à la diagonalisation de la matrice GCM pour les trois valeurs du paramètre X . De nouveau, l'effet net des corrélations quadrupolaires dans le fondamental, ainsi que des corrélations associées au cumul des trois mélanges de configuration considérés, est fortement croissante avec X .

La Fig. 16.15 présente les énergies d'excitations et les déformations intrinsèques moyennes des états 0^+ obtenus après l'inclusion des corrélations quadrupolaires. Contrairement au cas où les seules projections sur N et Z étaient prises en compte, la variation du paramètre X influe nettement sur les énergies des deux états les plus bas. La position de l'état oblate s'abaisse également pour des valeurs négatives du paramètre X mais reste toujours trop haute par rapport à l'expérience. La Fig. 16.16 suggère $X = -0.4$ comme valeur optimale pour reproduire l'énergie d'excitation de l'état 0^+ prolate. Cette figure montre également qu'une fois la restauration des symétries brisées effectuée, l'inclusion des corrélations quadrupolaires ne modifie pas significativement la déformation intrinsèque des deux premiers états 0^+ . Cette remarque est valable pour toutes les valeurs de X utilisées.

Du fait des trois projections réalisées dans le calcul, les fonctions collectives orthogonalisées sont re-définies par :

$$g_{q'_{20}, N, Z, I}^k = \sum_{q_{20}} \mathcal{I}_{N, Z, I}^{1/2}(q'_{20}, q_{20}) f_{q_{20}, N, Z, I}^k, \quad (16.17)$$

où

$$\mathcal{I}_{N, Z, I}(q'_{20}, q_{20}) = \langle \Phi(q'_{20}) | \hat{P}_I \hat{P}_N \hat{P}_Z | \Phi(q_{20}) \rangle. \quad (16.18)$$

Les fonctions d'onde des cinq premiers états collectifs sont données sur la Fig. 16.17 pour les trois valeurs du paramètre X . La fonction $g_{q_{20}, N, Z, I}^0$ de l'état fondamental s'élargit légèrement avec X en se creusant d'avantage dans le voisinage de $q_{20} = 0 b$. Ce comportement s'explique à la fois par la topologie des courbes d'énergie potentielle projetée et

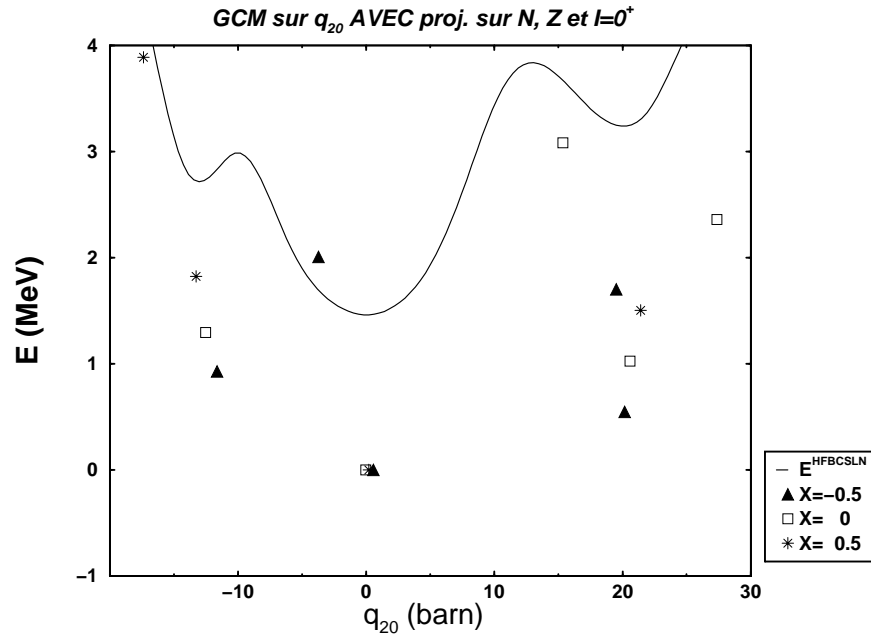


FIG. 16.15 – Mêmes quantités que sur la Fig 16.10 pour un mélange de configurations incluant en plus les corrélations liées à la projection de la fonction d'onde sur le moment angulaire 0^+ .

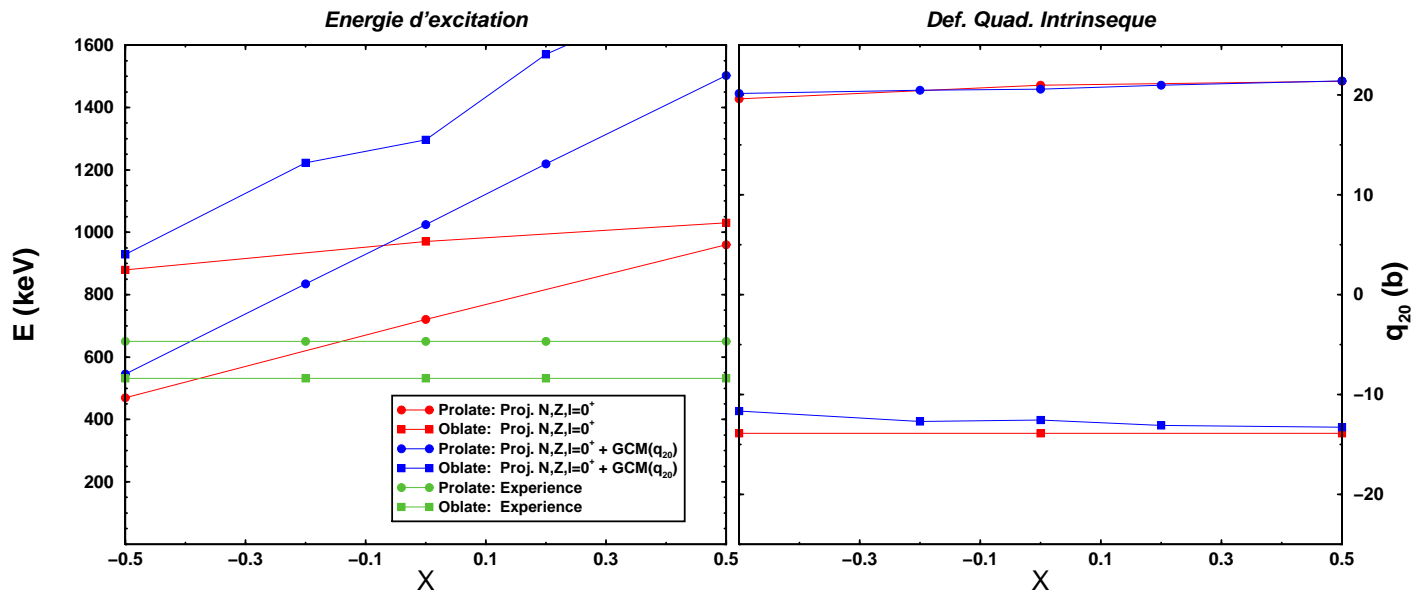


FIG. 16.16 – Gauche : énergies d'excitation des deux premiers états 0^+ en fonction du paramètre X . Droite : déformation intrinsèque moyenne de ces états.

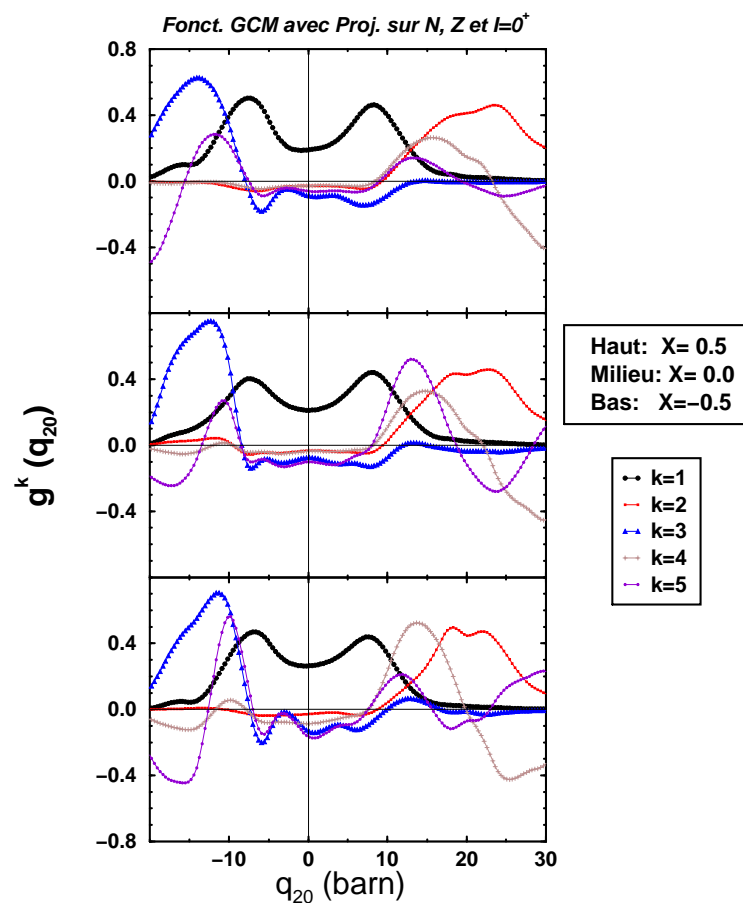


FIG. 16.17 – Fonctions d'onde collectives incluant à la fois les corrélations vibrationnelles quadrupolaires et les corrélations liées aux projections sur le bon nombre de nucléons et sur le moment angulaire.

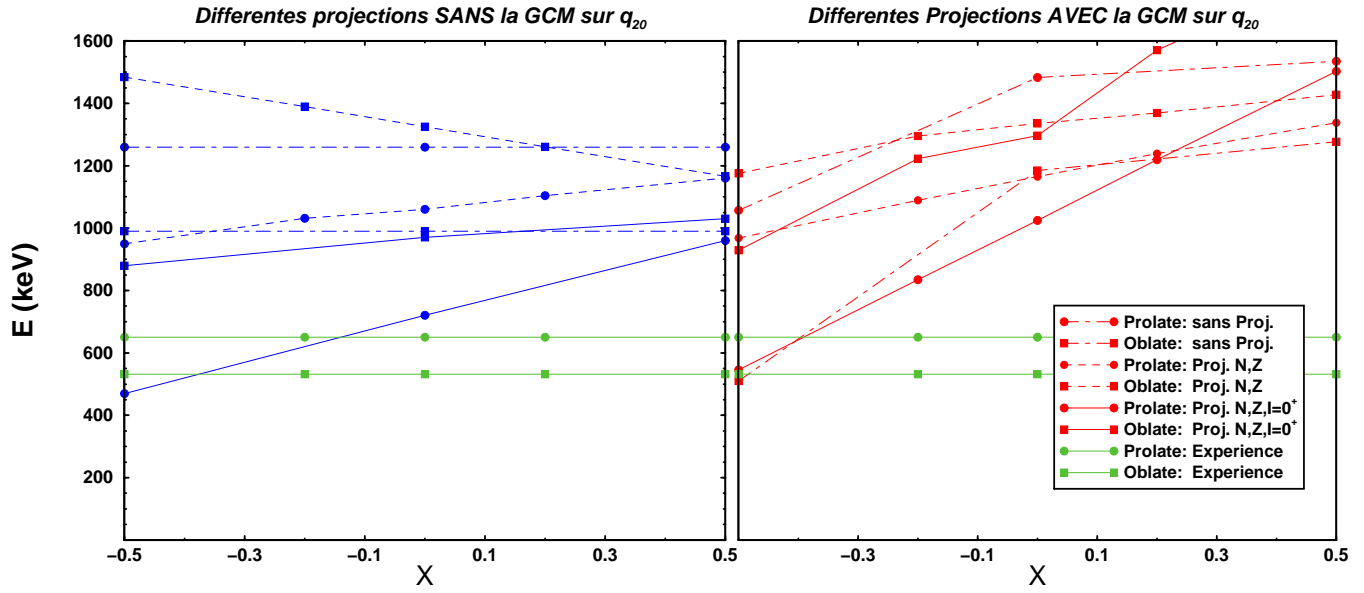


FIG. 16.18 – Énergies d'excitation des deux premiers états 0^+ en fonction de X à différents niveaux d'approximation.

par le comportement des éléments de matrice de couplage autour de $q_{20} = 0 b$. Concernant les deux premiers états excités, la structure des fonctions d'onde évolue avec X en accord avec le comportement des éléments de matrice de couplage autour de $q_{20} = 20 b$ et $q_{20} = -14 b$. Le changement est malgré tout assez faible, expliquant ainsi la constance de la déformation intrinsèque de ces états avec X . Les fonctions d'onde des états suivants sont plus chahutées par le choix de densité. Elles sont plus localisées par une décroissance du paramètre X .

16.2 Discussion.

La Fig. 16.18 propose un résumé des résultats obtenus sur les propriétés de coexistence de formes dans le ^{186}Pb dans nos calculs de mélange de configurations. Cette figure montre d'abord comment la prise en compte des différents types de corrélations de basse énergie influe sur l'énergie d'excitation des isomères selon une systématique qui n'est pas claire. Par exemple, les projections sur le nombre de particules puis sur le moment angulaire abaissent régulièrement l'énergie d'excitation du minimum prolate, tandis que l'état oblate est repoussé à plus haute énergie par la projection sur N et Z , puis abaissé par la restauration du spin. Lorsque l'ensemble des restaurations de symétries sont prises en compte, la diminution du paramètre X favorise le phénomène de coexistence de formes de telle sorte qu'une valeur comprise entre -0.1 et -0.2 permet une reproduction optimale de l'énergie d'excitation expérimentale attribuée à l'état prolate. L'état oblate est lui encore trop haut en énergie.

L'inclusion des corrélations quadrupolaires augmente systématiquement l'énergie d'excitation des premiers états excités par rapport au calcul statique ou au cas où seules les

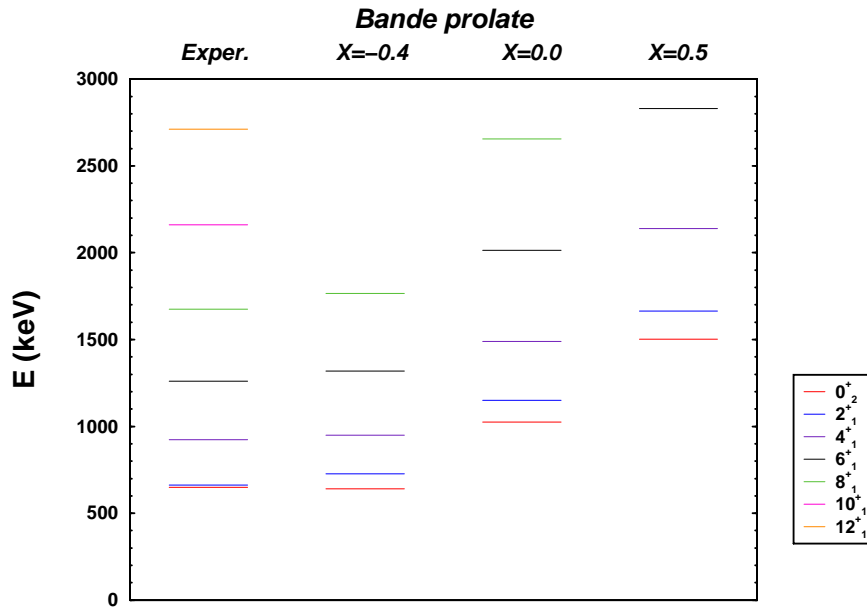


FIG. 16.19 – Énergies d'excitation des deux premiers états 0^+ en fonction de X .

restaurations de symétries sont prises en compte. Cela est dû au fait que les corrélations associées dans le fondamental sont trop importantes. Les trois calculs ont permis de montrer comment la modification de la dépendance en densité de l'interaction proposée ici permet de corriger cette déficience lorsque l'on se place dans la zone des X négatifs. D'une manière plus quantitative, il apparaît que l'inclusion des corrélations quadrupolaires sans la projection sur le moment angulaire n'autorise pas d'amélioration quant à la position des premiers états 0^+ . En revanche, lorsque les deux effets sont pris en compte, la diminution du paramètre X favorise nettement le phénomène de coexistence de formes. Ainsi, la valeur $X = -0.4$ permet une reproduction optimale de l'énergie d'excitation de l'état prolata lorsque l'ensemble des corrélations importantes dans le système sont incluses. L'énergie de l'état oblate est également améliorée par ce choix par rapport au cas standard ($X = 0$) même si elle reste nettement au dessus de l'expérience. L'inclusion des effets adiabatiques associés au couplage avec les configurations à deux qps construites sur la paire intruse [541 9/2] doit permettre d'abaisser encore la position de l'état oblate [56]. Le couplage entre les configurations à 0 et 2 qps se faisant par l'intermédiaire d'un vertex d'interaction hors couche d'énergie, la question de la dépendance dans le milieu d'un tel couplage reste aujourd'hui ouverte.

Au-delà de la position des états isomériques 0^+ de très basse énergie, la bande rotationnelle construite sur l'état prolata est connue expérimentalement dans le ^{186}Pb jusqu'au spin 14^+ [198, 200]. Au moyen du calcul GCM utilisant les fonctions projetées à la fois sur N , Z et I , nous obtenons cette bande pour les différentes valeurs du paramètre X . La Fig. 16.19 compare les données expérimentales aux résultats théoriques. La valeur -0.5 utilisée jusqu'ici a été remplacée par la valeur -0.4 autorisant une reproduction optimale de la tête de bande. On constate que cette valeur permet une excellente description de la bande à bas spin. Ce résultat est la conséquence de l'ajustement de la tête de bande,

mais aussi de l'amélioration très substantielle du moment d'inertie engendrée par la modification de la dépendance en densité dans l'interaction. Les énergies théoriques des états rotationnels de spins supérieures à 8^+ ne sont pas indiqués puisque la modification du moment d'inertie induite par la rotation doit être prise en compte pour de tels moments angulaires. Cela demande un calcul GCM utilisant des états obtenus par cranking et projetés sur N , Z et I . Cela ne sera possible que dans un futur proche [170].

Nous n'avons pas discuté les résultats concernant les probabilités de transition réduites $B(E_0)$ et $B(E_2)$ puisqu'aucune donnée expérimentale n'existe dans le ^{186}Pb . On peut malgré tout mentionner que le choix de la densité influe significativement sur ces observables. D'autres systèmes devront être étudiés afin de tester cette influence d'un point de vue quantitatif.

L'étude des énergies d'excitation et des fonctions d'onde collectives des états vibrationnels de basse énergie dans le ^{186}Pb semble donc indiquer qu'une valeur de X proche de -0.4 améliore nettement la description théorique des mouvements de grande amplitude dans ce noyau. Tandis que la valeur précise de ce paramètre est encore largement prospective et directement dépendante de la forme explicite des termes de la force, il est intéressant de se poser la question du contenu physique de son signe dont la valeur négative semble, elle, plus affirmée.

Il faut pour cela revenir à la dérivation de la force proposée dans la section 15.4. On constate tout d'abord que le terme relié aux forces à plus de deux corps reste répulsif sur l'ensemble de l'intervalle de variation de X considéré, les valeurs négatives correspondant à une augmentation de la répulsion. Le choix $X = -0.4$ est donc tout à fait raisonnable du point de vue de ce terme. Le point intéressant concerne le terme associé à la sommation des échelles de Brueckner, dont le caractère répulsif ou attractif est directement lié au signe de X . Selon la dérivation qui a été proposée, ce terme est issu de la correspondance :

$$\begin{aligned} \frac{V^2(\vec{r}, \vec{p})}{2} \left\{ \mathcal{K}_{t_p t_q}^\alpha(\vec{R}) + \mathcal{K}_{t_p t_q}^\beta(\vec{R}) \right\} &\rightarrow \frac{V^2(\vec{r}, \vec{p})}{2} \left\{ \mathcal{F}[\rho_0^\alpha(\vec{R})] + \mathcal{F}[\rho_0^\beta(\vec{R})] \right\} \\ &\rightarrow \frac{X t_3 (1 + x_3 P_\sigma) \delta(\vec{r})}{12} \left\{ [\rho_0^\beta(\vec{R})]^\sigma + [\rho_0^\alpha(\vec{R})]^\sigma \right\}, \end{aligned} \quad (16.19)$$

obtenue en développant $V^2(\vec{r}, \vec{p})$ à l'ordre zéro dans la portée. Dans cette écriture, les indices (t_p, t_q) désignent l'isospin des nucléons en interaction et t_3 est positif. La fonction $\mathcal{K}_{t_p t_q}^\alpha(\vec{R})$ désigne la partie locale du propagateur 13.28 dans la base $\{\alpha_n\}$ lorsqu'il est impliqué dans une interaction sur couche d'énergie :

$$\mathcal{K}_{t_p t_q}^\alpha(\vec{R}) = \sum_{\substack{\epsilon_{\alpha_r} > \epsilon_{F t_p}^\alpha \\ \epsilon_{\alpha_s} > \epsilon_{F t_q}^\alpha}} \frac{|\phi_{\alpha_s}(\vec{R})|^2 |\phi_{\alpha_r}(\vec{R})|^2}{2 \bar{E}_{t_p t_q} - \epsilon_{\alpha_r} - \epsilon_{\alpha_s}}, \quad (16.20)$$

et où l'énergie initiale $\epsilon_{\alpha_p} + \epsilon_{\alpha_q}$ a été approximée par une moyenne dans la mer de Fermi saturée en spin.

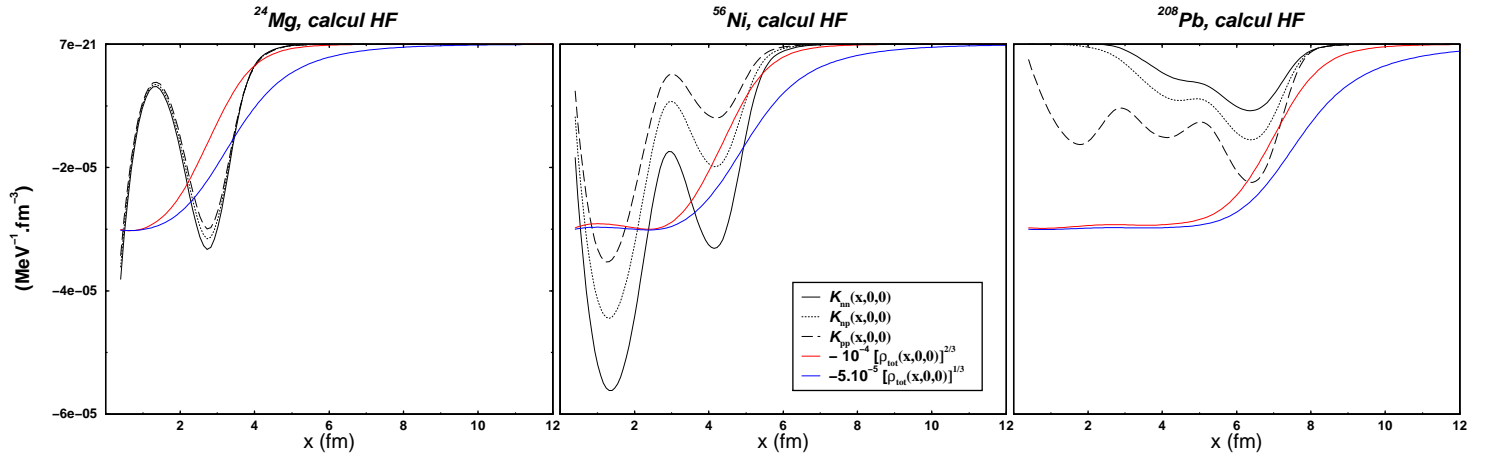


FIG. 16.20 – Densités locales d'énergie $\mathcal{K}_{tt'}(x, 0, 0)$ approximées par des fonctionnelles de la partie locale de la densité scalaire/isoscalaire. L'axe x correspond à un axe orthogonal à l'axe de symétrie dans le ^{24}Mg .

Le fait d'obtenir une bonne description de la structure du ^{186}Pb pour X négatif signifie en premier lieu que la sommation des échelles a un effet attractif dans le processus d'interaction de deux nucléons, ce qui ne saurait surprendre. La correspondance 16.19, qui n'est rien d'autre que l'ordre 1 dans la sommation des échelles, montre bien que $\mathcal{K}_{tt'}^\alpha(\vec{R})$ doit être négatif pour que cela soit vérifié. Cela est immédiat au regard de l'Eq. 16.20 puisque, l'énergie initiale étant nécessairement inférieure à $\epsilon_{\alpha_r} + \epsilon_{\alpha_s}$, chaque terme de la somme du membre de droite est négatif.

Au-delà de ce caractère attractif, la phénoménologie contenue dans le membre de droite de l'Eq. 16.19 suggère que ces corrélations à deux corps soient d'autant plus attractives que la densité de matière au centre de masse est importante. Cet effet est contre-intuitif si l'on considère le fait que les nucléons spectateurs réduisent l'espace des phases accessible aux deux nucléons en interaction lors de la sommation des échelles. Cet argument est en fait inadapté puisqu'il se rapproche plus d'un raisonnement fait sur la densité totale dans la matière nucléaire et transposé au noyau par une approximation de densité locale qu'à un raisonnement fait en fonction de la distance au centre d'un noyau fini à densité totale fixée. La structure des fonctions d'onde individuelles étant primordiale, elle peut invalider la vision du noyau comme constitué d'une succession de couches de matière nucléaire à différentes densités.

Il nous faut donc étudier le comportement de la fonction $\mathcal{K}_{tt'}^\alpha(\vec{R})$ dans les noyaux finis. Afin de nous faire une idée, nous présentons les résultats de trois calculs HF réalisés avec la force Sly4 pour trois noyaux de masses très différentes, à savoir le ^{24}Mg , le ^{56}Ni et le ^{208}Pb . Les fonctions $\mathcal{K}_{tt'}^\alpha(\vec{R})$ extraites de ces calculs auto-cohérents sont tracées pour les trois combinaisons d'isospin sur la Fig 16.20 en fonction de la coordonnée x ; y et z étant égaux à zéro. Ces fonctions sont comparées à deux fonctionnelles de la densité prenant la forme du membre de droite de l'Eq. 16.19 pour $\alpha = \beta$. Les deux fonctionnelles se différencient par les valeurs de σ et de $|Xt_3|$. La densité de matière $\rho_0(\vec{R})$ utilisée est

tirée du même calcul HF. Il est à noter que les paramètres entrant dans la définition de ces deux fonctionnelles ne sont pas modifiés d'un noyau à l'autre.

Dans les trois noyaux, les fonctions $\mathcal{K}_{tt'}^\alpha(\vec{R})$ n'ont pas un comportement monotone en fonction de la distance au centre du noyau. Les oscillations traduisent la nature discrète du spectre individuel ainsi que la structure des fonctions d'onde associées. Naturellement, l'ampleur des variations diminuent avec la masse du noyau. Au-delà de leur caractère oscillant, les fonctions $\mathcal{K}_{tt'}^\alpha(\vec{R})$ sont globalement plus négatives au centre du noyau qu'à la surface même si cela devient moins vrai lorsque la masse augmente. Ce résultat se traduit par le fait que l'évolution *moyenne* de ces fonctions avec x est correctement reproduite par les fonctionnelles de la densité totale, justifiant ainsi le succès obtenu par nos calculs pour le choix $X = -0.4$. Bien évidemment, la dépendance en isospin de la densité locale d'énergie $\mathcal{K}_{tt'}^\alpha(\vec{R})$ ne peut être reproduite par une telle fonctionnelle de $\rho_0(\vec{R})$, ce qui semble pouvoir être préjudiciable pour les noyaux exotiques. Du point de vue de la dépendance en masse, les résultats présentés ici couvrent une large variation de ce paramètre et ne semblent pas devoir justifier un raffinement des fonctionnelles phénoménologiques utilisées.

16.3 Perspectives.

L'étude présentée ici autorise donc une meilleure compréhension des caractéristiques du hamiltonien au-delà du champ moyen. Cela dit, d'autres calculs devront être réalisés avant de pouvoir valider les conclusions qui viennent d'être exposées. En particulier, la dépendance en densité de l'interaction proposée dans ce travail doit être testée pour d'autres types de mélanges de configurations. À ce titre, nous avons étudiés l'influence des corrélations octupolaires associées à la brisure et à la restauration de la parité dans le ^{240}Pu . Les résultats qui n'ont pu être présentés ici vont dans le même sens que ceux obtenus dans le ^{186}Pb en ce qui concerne l'amélioration de la description des états vibrationnels pour $X \leq 0$.

Il est également important de tester la paramétrisation proposée sur des observables liées aux états fondamentaux le long de lignes isotopiques et isotoniques. En effet, nous nous sommes concentrés sur les excitations du système, sans pouvoir statuer de manière directe sur l'influence importante du choix du paramètre X sur les corrélations dans le fondamental. À ce titre, des calculs portant sur l'évolution du rayon carré moyen de charges dans les isotopes de calcium sont en cours.

À plus long terme, des projets plus ambitieux utilisant les présents résultats pourront être envisagés. La première idée consiste à revenir à la définition de la force au niveau du champ moyen pour y inclure des modifications de sa dépendance en densité, notamment pour différencier l'effet de la force à trois corps et des resommations de Brueckner. Concernant la sommation des échelles, plusieurs types d'enrichissements discutés dans le chapitre 14 pourront également être envisagés.

Chapitre 17

Conclusions.

Nous avons présenté dans ce mémoire deux études portant sur la compréhension du traitement du problème à N corps dans le noyau. Ces deux études ont pour but commun d'identifier certaines propriétés de la force effective nucléon-nucléon en distinguant proprement le niveau d'approximation auquel on travaille d'une part et le canal de la force auquel on s'intéresse d'autre part.

La première de ces études a pour but de formaliser le lien entre une fonction de champ moyen décrivant un noyau pair-pair et celle décrivant le voisin pair-impair. Il a été montré comment la caractérisation de ce lien comme d'un processus se réalisant en deux étapes "disjointes" autorise une meilleure identification de la physique impliquée dans le processus d'ajout d'un nucléon dans le noyau. Le nucléon impair est d'abord ajouté dans un système fictif conservant la structure d'un noyau pair-pair. La seconde étape, qui donne véritablement son caractère impair au noyau, consiste à spécifier l'orbite finalement occupée par ce nucléon.

L'intérêt de ce découplage réside dans le fait que différents canaux de la force à deux corps sont impliqués dans chacune des deux étapes. La première ne sollicite que les termes de la fonctionnelle pairs sous renversement du temps. La seconde fait intervenir les termes associés au canal particule-trou impairs sous cette transformation, ainsi que le canal particule-particule de la force du fait du non-appariement du nucléon célibataire induit par la spécification de son état individuel. Ce schéma a ensuite été utilisé pour dériver des formules perturbatives permettant d'évaluer la contribution des termes impairs de la fonctionnelle à l'énergie de séparation d'un nucléon en présence et en l'absence d'appariement. Le schéma théorique et les formules perturbatives ont été validés au moyen de calculs HFB auto-cohérents portant sur les isotopes d'étain et de cérium.

Une étude approfondie de l'oscillation pair/impair des masses en fonction de l'intensité de l'appariement dans le système a été menée. Celle-ci a permis de comprendre la nature des contributions des différents canaux de la force à cette observable. Ainsi, l'évolution non-triviale de la contribution associée à la structure paire des noyaux avec l'appariement a été isolée. En parallèle, la nécessité d'une meilleure connaissance des termes impairs de la fonctionnelle de l'énergie pour conclure quant à la formule de différence de masses la plus apte à isoler le gap d'appariement au niveau de Fermi a été identifiée. Ces termes impairs sous renversement du temps n'étant pas bien connus aujourd'hui, c'est au prix d'un travail significatif sur ceux-ci qu'un ajustement précis de la force d'appariement sur

l'oscillation pair/impair des masses expérimentales sera possible.

La seconde étude rapportée dans ce mémoire porte sur les méthodes de calculs au-delà du champ moyen visant à inclure les corrélations associées aux mouvements de grande amplitude dans le noyau. Ces mouvements correspondent aux modes vibrationnels ainsi qu'aux modes d'énergie nulle associés aux brisures de symétries du champ moyen. Leurs effets sont introduits au moyen de la méthode de la coordonnée génératrice et de la méthode du champ moyen projeté qui se caractérisent par l'utilisation d'un mélange de fonctions de champ moyen non-orthogonales comme fonction d'essai dans le processus variationnel.

Contrairement à l'approximation de champ moyen, l'utilisation d'une telle fonction d'essai pour le calcul de l'énergie n'est motivée par aucune approximation bien définie d'un développement perturbatif de la fonction d'onde du système et des observables. Afin d'établir ce lien, nous avons développé une théorie de perturbation permettant d'écrire la fonction d'onde du système comme une combinaison linéaire d'excitations particule-trou relatives à plusieurs fonctions de champ moyen non-orthogonales. Utilisant la méthode de Brueckner pour resommer les corrélations à deux corps dans le développement de l'énergie correspondant, l'interaction effective minimale autorisant la régularisation du cœur dur de l'interaction nucléon-nucléon libre dans ce contexte a été définie. Les calculs associés à la méthode de la coordonnée génératrice et à celle du champ moyen projeté apparaissent alors à l'ordre le plus bas de la théorie de perturbation.

Procédant à une approximation locale de la matrice de Brueckner généralisée, nous avons proposé la première prescription reposant sur des bases théoriques solides pour la dépendance en densité des forces effectives phénoménologiques à utiliser dans les calculs de mélange de configurations. Cette prescription dépend de l'élément de matrice de H^{eff} entre états produit dans l'expression de l'énergie corrélée. Plus précisément la dépendance en densité de la force est une certaine fonctionnelle des densités de champ moyen associées au ket et au bra de l'élément de matrice dans lequel elle est insérée.

Afin de traiter d'une autre origine possible pour la dépendance en densité de l'interaction, nous avons montré en détails comment renormaliser l'effet des forces à plus de deux corps par une dépendance dans la densité mixte dans le cadre des calculs de mélange de configurations. De nouveau, cette densité dépend de l'éléments de matrice dans lequel elle est insérée.

Ces développements théoriques nous ont finalement permis de proposer une force de Skyrme étendue à utiliser dans les calculs au-delà du champ moyen. Cette forme fait apparaître un paramètre libre X caractérisant le poids relatif des dépendances en densité provenant de la resommation des corrélations à deux corps d'une part et de celle provenant de la renormalisation des forces à plus de deux corps d'autre part. Ce paramètre disparaît à l'approximation de champ moyen puisque les deux dépendances en densité redonnent la dépendance traditionnelle en la densité de champ moyen dans ce contexte.

Pour finir, cette prescription est testée par différents calculs de mélanges de configurations visant à reproduire le phénomène de coexistence de forme dans le ^{186}Pb . Le but de ces calculs est d'évaluer l'influence du choix de la densité dans le hamiltonien effectif en fonction du type de mélange de configurations considéré, puis de déterminer la valeur optimale du paramètre X . Afin d'y parvenir, nous avons étudié l'influence de ce paramètre en incluant successivement les corrélations associées aux vibrations quadru-

polaires, à la projection sur le nombre de particules et à la projection sur le moment angulaire. Les résultats montrent qu'un choix raisonnable du paramètre X autorise une amélioration certaine de la description du phénomène de coexistence de formes dans le ^{186}Pb par rapport à l'ensemble des calculs réalisés jusqu'à ce jour.

Bibliographie

- [1] P. G. Hansen, A. S. Jensen et B. Jonson, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **45** (1995) 591 ;
P. G. Hansen et B. Jonson, Europhys. Lett. **4** (1997) 409
- [2] I. Tanihata, *et al.*, Phys. Lett. **B160** (1985) 380 ; I. Tanihata, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 2676 ; I. Tanihata, *et al.*, Phys. Lett. **B206** (1988) 592 ; I. Tanihata, J. Phys. **G22** (1996) 157
- [3] S. A. Fayans, S. V. Tolokonnikov et D. Zawischa, Phys.Lett. **B491** (2000) 245
- [4] B. Nerlo-Pomorska, K. Pomorski, J. F. Berger et J. Dechargé, Eur. Phys. J. **A8** (2000) 19
- [5] M. V. Zhukov, *et al.*, Phys. Rep. **231** (1993) 151
- [6] J. Dobaczewski, Acta Phys.Polon. **B30** (1999) 1647
- [7] E. Khan, N. Sandulescu, M. Grasso et Nguyen Van Giai, nucl-th/0203056
- [8] J. Dobaczewski, Plenary talk at the INPC'01, Berkeley, USA, 30 July - 3 August, 2001
- [9] J. Terasaki, P.-H. Heenen, H. Flocard et P. Bonche, Nucl. Phys **A600** (1996) 371
- [10] M. Grasso, N. Sandulescu, Nguyen Van Giai et R. J. Liotta, Phys. Rev. **C64** (2001) 064321
- [11] P. Bonche, S. Levit et D. Vautherin, Nucl. Phys. **A427** (1984) 278
- [12] P. Bonche, S. Levit et D. Vautherin, Nucl. Phys. **A436** (1985) 265
- [13] C. N. Davids, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 1849
- [14] P. J. Woods et C. N. Davids, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **47** (1997) 541
- [15] W. Mittig, *et al.*, Nucl. Phys. **A616** (1997) 329c
- [16] W. Satula, D. J. Dean, J. Gary, S. Mizutori et W. Nazarewicz, Phys. Lett. **B407** (1997) 103
- [17] W. Satula et R. Wyss, Phys. Rev. Lett. **86** (2001) 4488 ; Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 052504
- [18] Y. T. Oganessian, *et al.*, Eur. Phys. J. **A5** (1999) 68 ; Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 3154 ; Nature **400** (1999) 209 ; Phys. Rev. **C62** (2000) 041604(R) ; Phys. Rev. **C63** (2001) 011301(R)
- [19] S. Cwiok, J. Dobaczewski, P.-H. Heenen, P. Magierski et W. Nazarewicz, Nucl. Phys. **A611** (1996) 211

- [20] M. Bender, K. Rutz, P.-G. Reinhard, J. A. Maruhn et W. Greiner, Phys. Rev. **C60** (1999) 034304
- [21] A. T. Kruppa, M. Bender, W. Nazarewicz, P.-G. Reinhard, T. Verse et S. wiok, Phys. Rev. **C61** (2000) 034313
- [22] M. Bender, W. Nazarewicz et P.-G. Reinhard, Phys. Lett. **B515** (2001) 42
- [23] J. Terasaki, P.-H. Heenen, P. Bonche, J. Dobaczewski et H. Flocard, Nucl. Phys. **A593** (1995) 1
- [24] J. Terasaki, H. Flocard, P.-H. Heenen et P. Bonche, Phys. Rev. **C55** (1997) 1231
- [25] A. Valor, J. L. Egidio et L. M. Robledo, Nucl. Phys. **A665** (2000) 46
- [26] A. Valor, J. L. Egidio et L. M. Robledo, Nucl. Phys. **A671** (2000) 189
- [27] A. V. Afanasjev et P. Ring, Phys. Rev. **C62** (2000) 031302
- [28] A. V. Afanasjev, P. Ring et J. Konig, Nucl. Phys. **A676** (2000) 196
- [29] C. Rigollet, P. Bonche, H. Flocard et P.-H. Heenen, Phys. Rev. **C59** (1999) 3120
- [30] T. Duguet, P. Bonche et P.-H. Heenen, Nucl. Phys. **A679** (2001) 427
- [31] J. Dobaczewski et J. Dudek, Phys. Rev. **C52** (1995) 1827, erratum in Phys. Rev. **C55** (1997) 3177
- [32] M. Bender, J. Dobaczewski, J. Engel et W. Nazarewicz, preprint nucl-th/0112056
- [33] S. C. Pieper et R. B. Wiringa, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. **51** (2001) 53
- [34] M. Hjorth-Jensen, E. Osnes et H. Muether, Ark. Fys. **213** (1992) 102
- [35] P. Navratil et B. R. Barrett, Phys. Rev. **C54** (1996) 2986; P. Navratil et B. R. Barrett, Phys. Rev. **C57** (1998) 3119; P. Navratil, J. P. Vary et B. R. Barrett, Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 5728
- [36] A. Poves, J. Sanchez-Solano, E. Caurier et F. Nowacki, Nucl. Phys. **A694** (2001) 157
- [37] M. Bender, P.-H. Heenen et P.-G. Reinhard, accept pour publication dans Rev. Mod. Phys.
- [38] V. Bernard et Nguyen Van Giai, Nucl. Phys. **A348** (1980) 75
- [39] T. Duguet, P. Bonche, P.-H. Heenen et J. Meyer, Phys. Rev. **C65** (2002) 014310
- [40] P. Ring et P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag, New-York, 1980)
- [41] J. Dobaczewski et W. Nazarewicz, preprint nucl-th/0203038, Presented at the Yukawa International Seminar 2001 (YKIS01) on Physics of Unstable Nuclei, Kyoto, Japan, 5-10 November 2001, to be published in Progress of Theoretical Physics
- [42] S. Pru, M. Girod et J. F. Berger, Eur. Phys. J. **A9** (2000) 35
- [43] R. R. Rodrguez-Guzmn, J. L. Egidio et L. M. Robledo, Phys. Rev. **C65** (2002) 024304
- [44] R. R. Rodrguez-Guzmn, J. L. Egidio et L. M. Robledo, nucl-th/0204074
- [45] H. Simon, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 496
- [46] H. Keller, *et al.*, Z. Phys. **A348** (1994) 61

- [47] H. Iwasaki, *et al.*, Phys. Lett. **B491** (2000) 8; H. Iwasaki, *et al.*, Phys. Lett. **B481** (2000) 7
- [48] R. R. Rodríguez-Guzmán, J. L. Egido et L. M. Robledo, Phys. Rev. **C62** (2000) 054319
- [49] D. Guillemaud-Möller, *et al.*, Nucl. Phys. **A426** (1984) 37; T. Motobayashi, *et al.*, Phys. Lett. **B346** (1995) 9
- [50] J. Terasaki, H. Flocard, P.-H. Heenen et P. Bonche, Nucl. Phys. **A621** (1997) 706
- [51] P.-H. Heenen, P. Bonche, S. Ćwiok, W. Nazarewicz et A. Valor, Riken Review No. 10 (1999)
- [52] Y. Utsuno, T. Otsuka, T. Mizusaki et M. Honma, Phys. Rev. **C60** (1999) 054315
- [53] W. Nazarewicz, Phys. Lett. **B305** (1993) 195
- [54] M. Bender, T. Cornelius, G. A. Lalazissis, J. A. Maruhn, W. Nazarewicz et P.-G. Reinhard, nucl-th/0110057
- [55] T. Nikšić, D. Vretenar, P. Ring et G. A. Lalazissis, nucl-th/0204022
- [56] N. Tajima, H. Flocard, P. Bonche, J. Dobaczewski et P.-H. Heenen, Nucl. Phys. **A551** (1993) 409
- [57] R. R. Chasman, J. L. Egido et L. M. Robledo, Phys. Lett. **B513** (2001) 325
- [58] W. C. Haxton et C.-L. Song, Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 5484
- [59] W. C. Haxton et T. Luu, Nucl. Phys. **A690** (2001) 15c
- [60] K. A. Brueckner, C. A. Levinson et H. M. Mahmoud, Phys. Rev. **95** (1954) 217; K. A. Brueckner et C. A. Levinson, Phys. Rev. **97** (1954) 1344; K. A. Brueckner, J. L. Gammel et H. Weitzner, Phys. Rev. **110** (1958) 431; K. A. Brueckner, A. M. Lockett et M. Rotenberg, Phys. Rev. **121** (1961) 255
- [61] J. Goldstone, Proc. Roy. Soc. (London) **A239** (1957) 267
- [62] N. M. Hugenholtz, Physica **23** (1957) 481
- [63] C. Bloch, Nucl. Phys, **7** (1958) 451
- [64] C. Bloch, Nucl. Phys, **6** (1958) 329; C. Bloch et J. Horowitz, Nucl. Phys, **8** (1958) 91
- [65] W. Zuo, I Bombaci et U. Lombardo, Phys. Rev. **C60** (1999) 024605; A. Lejeune, U. Lombardo et W. Zuo, Phys. Lett. **477** (2000) 45; W. Zuo, A. Lejeune, U. Lombardo et J. F. Mathiot, nucl-th/0202076; W. Zuo, A. Lejeune, U. Lombardo et J. F. Mathiot, nucl-th/0202077
- [66] J. W. Negele et D. Vautherin, Phys. Rev. **C5** (1972) 1472; J. W. Negele et D. Vautherin, Phys. Rev. **C11** (1975) 1031
- [67] J. W. Negele, Lecture Notes in Physics 40. B.R. Barrett, Ed. Springer-Verlag, Berlin, 1975
- [68] J. W. Negele, Rev. Mod. Phys., **54** (1982) 913
- [69] X. Campi et A. Bouyssy, Phys. Lett. **B73** (1978) 263
- [70] T. H. Koopmans, Physica **1** (1934) 104

- [71] A. Messiah, *Mécanique Quantique* (Dunod, Paris, 1960)
- [72] M. Gell-Mann et F. Low, Phys. Rev. **84** (1951) 350
- [73] A. Fetter et J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971)
- [74] B. D. Day, Rev. Mod. Phys. **39** (1967) 719
- [75] W. H. Dickhoff et H. Müther, Rep. Prog. Phys. **11** (1992) 1947
- [76] H. Müther et A. Polls, Prog. Part. Nucl. Phys. **45** (2000) 243
- [77] H. Q. Song, M. Baldo, G. Giansiracusa et U. Lombardo, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 1584
- [78] H. S. Köhler, Phys. Rep. **18** (1975) 217
- [79] D. J. Thouless, Phys. Rev. **112** (1958) 906
- [80] H. A. Bethe, B.H. Brandow et A. G. Petschek, Phys. Rev. **129** (1963) 225
- [81] B. H. Brandow, Phys. Rev. **152** (1966) 863
- [82] R. L. Becker, A.D. Mackellar et B. M. Morris, Phys. Rev. **174** (1968) 1264
- [83] H. S. Köhler et R.J. McCarthy, Nucl. Phys. **A106** (1968) 313
- [84] R. K. Tripathi, A. Faessler et A. D. Mackellar, Phys. Rev. **C8** (1973) 129
- [85] P. U. Sauer, in *Proc. Int. Conf. on Nuclear Self-Consistent Fields, ICTP, Trieste, 1975* (R. Ripka et M. Porneuf, eds), North-Holland, Amsterdam and Oxford
- [86] K. T. R. Davies, R. J. Mc Carty et P. U. Sauer, Phys. Rev. **C6** (1972) 1461
- [87] K. T. R. Davies, R. J. Mc Carty, J. W. Negele et P. U. Sauer, Phys. Rev. **C10** (1974) 2607
- [88] R. L. Becker et M. R. Patterson, Nucl. Phys. **A178** (1971) 88
- [89] H. S. Köhler, Phys. Rev. **137** (1965) B1145
- [90] H. S. Köhler, Nucl. Phys. **A139** (1969) 353
- [91] N. Kaiser, S. Fritsch et W. Weise, nucl-th/0105057; N. Kaiser et W. Weise, nucl-th/0109052
- [92] R. Rajaraman et H. Bethe, Rev. Mod. Phys. **39** (1967) 745
- [93] M. Baldo, G. Giansiracusa, U. Lombardo et H. Q. Song, Phys. Lett. **B473** (2000) 1
- [94] B.D. Day, Phys. Rev. **187** (1969) 1269; B.D. Day, Phys. Rev. **C24** (1981) 1203; B.D. Day, Phys. Rev. Lett. **47** (1981) 226
- [95] S. Fayans et D. Zawischa, Int. J. Mod. Phys. **B15** (2001) 1684
- [96] I. Z. Petkov et M. V. Stoitsov, *Nuclear Density Functional Theory* (Clarendon Press, Oxford, 1991)
- [97] P. Hohenberg et W. Kohn, Phys. Rev. **136** (1964) 864
- [98] J. W. Negele, Phys. Rev. **C1** (1970) 1260
- [99] N. N. Bogolyubov, Soviet Phys. JETP **7** (1958) 41; N. N. Bogolyubov, Soviet Phys. Usp. **2** (1959) 236; N. N. Bogolyubov et V. G. Soloviev, Soviet Phys. Doklady **4** (1959) 143

- [100] D. Zawischa, Phys. Lett. **B155** (1985) 309; D. Zawischa, U. Regge et R. Stapel, Phys. Lett. **B185** (1987) 299; U. Regge et D. Zawischa, Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 149; S. Fayans, S. V. Tolokonnikov, E. L. Trykov et D. Zawischa, Phys. Lett. **B338** (1994) 1; S. Fayans et D. Zawischa, Phys. Lett. **B383** (1996) 19; S. Fayans, S. V. Tolokonnikov, E. L. Trykov et D. Zawischa, Nucl. Phys. **A676** (2000) 49
- [101] C. Bloch et A. Messiah, Nucl. Phys. **39** (1962) 95
- [102] J. Dobaczewski, H. Flocard et J. Treiner, Nucl. Phys. **A422** (1984) 103
- [103] B. Banerjee, H. J. Mang et P. Ring, Z. Phys. **A215** (1973) 366
- [104] P. Ring, R. Beck et H. J. Mang, Z. Phys. **231** (1970) 10
- [105] J. Dechargé et D. Gogny, Phys. Rev. **C21** (1980) 1568
- [106] A. Bulgac, preprint FT-194-1980, CIP, Bucharest; nucl-th/9907088
- [107] P. Bonche, H. Flocard, P.-H. Heenen, S. J. Krieger et M. S. Weiss, Nucl. Phys. **A443** (1985) 39
- [108] H. J. Lipkin, Ann. Phys. (NY) **9** (1960) 272; H. J. Lipkin, Ann. Phys. (NY) **12** (1961) 452
- [109] Y. Nogami, Phys. Rev. **B134** (1964) 313; Y. Nogami et I. J. Zucker, Nucl. Phys. **60** (1964) 203
- [110] H. C. Pradhan, Y. Nogami et J. Law, Nucl. Phys. **A201** (1973) 357
- [111] B. Gall, P. Bonche, J. Dobaczewski, H. Flocard et P.-H. Heenen, Z. Phys. **A348** (1994) 183
- [112] P. Quentin, N. Redon, J. Meyer et M. Meyer, Phys. Rev. **C41** (1990) 341
- [113] M. Bender, K. Rutz, P.-G. Reinhard et J. A. Maruhn, Eur. Phys. J. **A8** (2000) 59
- [114] A. B. Migdal, *Theory of finite Fermi systems and application to atomic nuclei*, Wiley, New-York, 1967
- [115] P. Nozières, *Theory of interacting Fermi systems*, Benjamin, New-York, 1964
- [116] L. P. Gorkov, Sov. Phys. **JETP7** (1958) 505
- [117] E. M. Henley et L. Wilets, Phys. Rev. **133** (1964) B1118
- [118] W. H. Dickhoff, Phys. Lett. **B210** (1988) 15
- [119] U. Lombardo et H.-J. Schulze, nucl-th/0012209 et référence inclues
- [120] E. Garrido, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra et P. Schuck, Phys. Rev. **C60** (1999) 064312
- [121] J. Terasaki, F. Barranco, P.-F. Bortignon, R. A. Broglia et E. Vigezzi, nucl-th/0109056 et références inclues
- [122] T. H. R. Skyrme, Philos. Mag. **1** (1956) 1043; T. H. R. Skyrme, Nucl. Phys. **9** (1959) 615
- [123] D. Gogny, in *Proc. Int. Conf. on Nuclear Self-Consistent Fields, ICTP, Trieste, 1975* (R. Ripka et M. Porneuf, eds), North-Holland, Amsterdam and Oxford
- [124] M. Grasso, Nguyen Van Giai et N. Sandulescu, nucl-th/0112061

- [125] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer et R. Schaeffer, Nucl. Phys. **A627** (1997) 710; Nucl. Phys. **A635** (1998) 231; Nucl. Phys. **A643** (1998) 441(E)
- [126] J. Dobaczewski et J. Dudek, *in High Angular Momentum Phenomena, Workshop in honour of Zdzisław Szymański, Piaski, Poland, August 23-26, 1995*, Acta Phys. Pol. **B27** (1996) 45
- [127] B.D. Chang, Phys. Lett. **B56** (1975) 205
- [128] M. Waroquier, K. Heyde et G. Wenes, Nucl. Phys. **A404** (1983) 269; M. Waroquier, G. Wenes et K. Heyde, Nucl. Phys. **A404** (1983) 298
- [129] J. P. Blaizot, Phys. Rep. **64** (1980) 171
- [130] G. F. Bertsch et H. Esbensen, Ann. Phys. (NY) **209** (1991) 327
- [131] N. Tajima, P. Bonche, H. Flocard, P.-H. Heenen et M. S. Weiss, Nucl. Phys. **A551** (1993) 434
- [132] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz et P. G. Reinhard, Nucl. Phys. **A693** (2001) 361
- [133] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz et M. V. Stoistov, nucl-th/0203060
- [134] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz et M. V. Stoistov, Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop *The Nuclear Many-Body Problem 2001*, Brijuni, Croatie, 2-5 Juin, 2001; nucl-th/010973
- [135] S. J. Krieger, P. Bonche, H. Flocard, P. Quentin et M. S. Weiss, Nucl. Phys. **A517** (1990) 275
- [136] H. Esbensen, G. F. Bertsch et K. Hencken, Phys. Rev. **C56** (1997) 3054
- [137] J. F. Berger, M. Girod et D. Gogny, Comp. Phys. Comm. **63** (1991) 365
- [138] M. Baldo, J. Cugnon, A. Lejeune et U. Lombardo, Nucl. Phys. **A515** (1990) 409
- [139] D. S. Delion, M. Baldo et U. Lombardo, Nucl. Phys. **A593** (1995) 151
- [140] F. Barranco, R. A. Broglia, H. Esbensen et E. Viguzzi, Phys. Lett. **B390** (1997) 13
- [141] A. Bulgac et Y. Yu, Phys. Rev. Lett. **88** (2002) 042504; A. Bulgac, Phys. Rev. **C65** (2002) 051305(R)
- [142] S. Takahara, N. Onishi et N. Tajima, Phys. Lett. **B331** (1994) 261
- [143] T. Duguet, P. Bonche, P.-H. Heenen et J. Meyer, Phys. Rev. **C65** (2002) 014311
- [144] P. Ring, R. Beck et H.J. Mang, Zeit. Physik **231** (1970) 10
- [145] W. Satula, R. Wyss and P. Magierski, Nucl. Phys. **A578** (1994) 45
- [146] H. Flocard, *Cours d'été des Houches, 2000*
- [147] N. M. Hugenholtz et L. van Hove, Physica **24** (1958) 363
- [148] R. L. Becker, Phys. Lett. **B32** (1970) 263
- [149] R. L. Becker, Phys. Rev. Lett. **24** (1970) 400
- [150] P.-H. Heenen et R. V. F. Janssens, Phys. Rev. **C57** (1998) 159
- [151] P.-H. Heenen, P. Bonche et H. Flocard, Nucl. Phys. **A588** (1995) 490
- [152] W. Satula, Plenary talk at Nuclear Structure'98, AIP Conference Proceedings 481, ed. C. Baktash American Inst. of Physics, New York 1999, p. 141

- [153] W. Satula, communication privée
- [154] K. Rutz, M. Bender, P.-G. Reinhard et J.A. Maruhn, Phys. Lett. **B468** (1999) 1
- [155] D.G. Madland et J.R. Nix, Nucl. Phys. **A476** (1988) 1
- [156] P. Moller et J.F. Nix, Nucl. Phys. **A536** (1992) 20
- [157] A. Bohr, B.R. Mottelson et D. Pines, Phys. Rev. **110** (1958) 936
- [158] A. Bohr et B.R. Mottelson, *Nuclear Structure (Benjamin, New York 1969) Vol. 1*
- [159] H. Häkkinen, J. Kolehmainen, M. Koskinen, P.O. Lipas et M. Manninen, Phys. Rev. Letters **78** (1997) 1034
- [160] K. Clemenger, Phys. Rev. **B32** (1985) 1359
- [161] M. Manninen, J. Mansikka-aho, H. Nishioka et Y. Takahashi, Z. Phys. **D31** (1994) 259; C. Yannouleas et U. Landman, Phys. Rev. **B51** (1995) 1902
- [162] W. Satula, J. Dobaczewski et W. Nazarewicz, Phys. Rev. Letters **81** (1998) 3599
- [163] G. Audi et A.H. Wapstra, Nucl. Phys. **A595** (1995) 409
- [164] S. Hilaire, J.-F. Berger, M. Girod, W. Satula et P. Schuck, accepté pour publication dans Phys. Lett. **B**
- [165] D. Hill et J. A. Wheeler, Phys. Rev. **89** (1953) 1106
- [166] P. Bonche, J. Dobaczewski, H. Flocard, P.-H. Heenen, S. J. Krieger, J. Meyer et M. S. Weiss, Nucl. Phys. **A519** (1990) 509
- [167] P. Bonche, S. J. Krieger, M. S. Weiss, J. Dobaczewski, H. Flocard et P.-H. Heenen, Phys. Rev. Lett. **66** (1991) 876
- [168] M. Didong, H. Müther, K. Goeke et A. Faessler, Phys. Rev. **C14** (1976) 1189; H. Müther, K. Goeke, K. Allaart et A. Faessler, Phys. Rev. **C15** (1977) 1467
- [169] N. Tajima, H. Flocard, P. Bonche, J. Dobaczewski et P.-H. Heenen, Nucl. Phys. **A542** (1992) 355
- [170] M. Bender et P.-H. Heenen, communication privée
- [171] R. Balian et E. Brezin, Nuovo Cim. **B64** (1969) 37
- [172] P. Bonche, J. Dobaczewski, H. Flocard, P.-H. Heenen et J. Meyer, Nucl. Phys. **A510** (1990) 466
- [173] R. E. Peierls et J. Yoccoz, Proc. Phys. Soc. **A70** (1957) 381
- [174] K. Dietrich, H. J. Mang et P. Ring, Nucl. Phys. **A339** (1980) 390
- [175] J. L. Egido et P. Ring, Nucl. Phys. **A383** (1982) 189; J. L. Egido et P. Ring, Nucl. Phys. **A388** (1982) 19
- [176] J. P. Blaizot et G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems* (The MIT press, Cambridge, 1986)
- [177] M. Anguiano, J. L. Egido et L. M. Robledo, nucl-th/0205017
- [178] A. Valor, P.-H. Heenen et P. Bonche, Nucl. Phys. **A671** (2000) 145
- [179] R. Rodríguez-Guzmán, J. L. Egido et L. M. Robledo, Phys. Lett. **B474** (2000) 15
- [180] Q. Haider et D. Gogny, J. Phys. G : Nucl Part. Phys. **18** (1992) 993

- [181] P.-H. Heenen, A. Valor, M. Bender, P. Bonche and H. Flocard, *Eur. Phys. J.* **A11** (2001) 393
- [182] D. Vautherin and D. M. Brink, *Phys. Rev.* **C5** (1972) 626
- [183] A. Valor, J. L. Egido et L. M. Robledo, *Phys. Lett.* **B392** (1997) 249
- [184] M. Anguiano, J. L. Egido et L. M. Robledo, *Nucl. Phys.* **A696** (2001) 167
- [185] H. A. Bethe, *Phys. Rev.* **167** (1968) 879
- [186] C.W. Wong, *Nucl. Phys.* , **A91** (1967) 399
- [187] K. Hagino, P.-G. Reinhard et G. F. Bertsch, *Phys. Rev.* **C65** (2002) 064320
- [188] D. W. L. Sprung et P. K. Banerjee, *Nucl. Phys.* **A168** (1971) 273
- [189] S. A. Coon et H. S. Kökler, *Nucl. Phys.* **A231** (1974) 95 ; H. S. Kökler, *Nucl. Phys.* **A258** (1976) 301
- [190] P. Siemens, *Nucl. Phys.* **A141** (1970) 225
- [191] J. Dobaczewski, communication privée
- [192] P. Van Duppen et al., *Phys. Lett.* **B154** (1985) 354
- [193] P. Dendooven et al., *Phys. Lett.* **B226** (1989) 27
- [194] J. F. C. Cocks et al., *Eur. J. Phys.* **A3** (1998) 17
- [195] G. Dracoulis, A. P. Byrne et A. M. Baxter, *Phys. Lett.* **B432** (1998) 37
- [196] G. Dracoulis et al., *Phys. Rev.* **C60** (1999) 014303
- [197] D. G. Jenkins et al., *Phys. Rev.* **C62** (2000) 021302(R)
- [198] J. Heese et al., *Phys. Lett.* **B302** (1993) 390
- [199] R. G. Allatt et al., *Phys. Lett.* **B437** (1998) 29
- [200] A. N. Andreyev et al., *Nature* **405** (2000) 430
- [201] J. C. Batchelder et al., *Perspectives in Nuclear Physics*, Nassau
- [202] G. J. Lane et al., *Nucl. Phys.* **A586** (1995) 316
- [203] J. Wauters et al., *Phys. Rev. Lett.* **72** (1994) 1329
- [204] J. Wauters et al., *Phys. Rev.* **C50** (1994) 2768
- [205] W. Nazarewicz, *Phys. Lett.* **B305** (1993) 195
- [206] R. R. Chasman, *Phys. Lett.* **B319** (1993) 41
- [207] M. Bender, T. Cornelius, G. A. Lalazissis, J. A. Maruhn, W. Nazarewicz et P. G. Reinhard, *Eur. Phys. J.* **A14** (2002) 23
- [208] P. G. Reinhard, D. J. Dean, W. Nazarewicz, J. Dobaczewski, J. A. Maruhn et M. R. Strayer, *Phys. Rev.* **C60** (1999) 014316
- [209] R. Bengtsson et W. Nazarewicz, *Z. Phys.* **A334** (1989) 269
- [210] P. Bonche, H. Flocard et P.-H. Heenen, *Nucl. Phys.* **A467** (1987) 115
- [211] Y. M. Engel, D. M. Brink, K. Goeke, S. J. Krieger et D. Vautherin, *Nucl. Phys.* **A249** (1975) 215
- [212] F. Stancu, D. M. Brink et H. Flocard, *Phys. Lett.* **B68** (1977) 108

-
- [213] K. Liu, H. Luo, Z. Ma, Q. Shen et S. A. Moszkowski, Nucl. Phys. **A534** (1991) 1 ;
K. Liu, H. Luo, Z. Ma et Q. Shen, *ibid*, 25 ; K. Liu, H. Luo, Z. Ma, M. Feng et Q.
Shen, *ibid*, 48 ; K. Liu, Z. Ma et H. Luo, *ibid*, 58
- [214] F. Tondeur, Phys. Lett. **B123** (1983) 139
- [215] M. Beiner, H. Flocard, Nguyen Van Giai et P. Quentin, Nucl. Phys. **A238** (1975)
29
- [216] P. G. Reinhard et H. Flocard, Nucl. Phys **A584** (1995) 467

Annexe A

Éléments de matrice de G^α .

Un élément de matrice de l'interaction G^α définie par l'Eq. 3.14 s'écrit :

$$G_{\alpha_m \alpha_n \alpha_p \alpha_q}^\alpha(W_\alpha) = V_{\alpha_m \alpha_n \alpha_p \alpha_q} + \frac{1}{2} \sum_{\epsilon_{\alpha_r}, \epsilon_{\alpha_s} > \epsilon_F^\alpha} \frac{V_{\alpha_m \alpha_n \alpha_r \alpha_s} G_{\alpha_r \alpha_s \alpha_p \alpha_q}^\alpha(W_\alpha)}{\epsilon_{\alpha_p} + \epsilon_{\alpha_q} - \epsilon_{\alpha_r} - \epsilon_{\alpha_s} - W_\alpha} . \quad (\text{A.1})$$

Dans cette définition, W_α correspond à l'énergie d'excitation totale de l'état intermédiaire à N corps juste avant l'interaction G^α . Un élément de matrice sera dit *sur couche d'énergie* si $W_\alpha = 0$. Cela signifie que les dénominateurs en énergie figurant dans l'Eq. A.1 correspondent à l'écart en énergie entre les états initial et final pour chaque interaction V dans l'échelle.

Dans l'Eq. A.1, nous avons considéré des éléments de matrice non-antisymétrisés de V , ce qui nécessite d'antisymétriser ceux de G^α . Nous aurions également pu utiliser des éléments de matrice antisymétrisés de V pour obtenir directement des éléments de matrice antisymétrisés de G^α .

Annexe B

Bases à un corps.

Les brisures de symétries apparaissant au niveau du champ moyen ont été discutées dans les sections 4.1.1 et 4.2.1. Nous avons rappelé à cette occasion dans quelles mesures les caractéristiques des bases à un corps utilisées (essentiellement la base propre du champ HF et la base canonique) dépendent de la conservation ou de la brisure de telle ou telle symétrie dans le système. Nous allons maintenant décliner les différents cas d'intérêt.

B.1 Noyau sphérique.

Lorsque la symétrie de rotation est conservée (état fondamental des noyaux magiques pairs ou impairs et des noyaux doublement magiques), les états individuels peuvent être caractérisés par les nombres quantiques (n, l, j, m_z, t) et présentent une dégénérescence d'ordre $2j + 1$ par rapport à m_z . Dans cette notation, n est le nombre quantique principal, l caractérise le moment cinétique orbital, j le moment angulaire total, m_z représente la projection de celui-ci sur l'axe z tandis que t désigne l'isospin. Les fonctions d'onde individuelles seront donc notées $\phi_{I=nlj}(\vec{r}, m_z, t)$.

Il est à noter que, l étant bien défini, la parité de la fonction d'onde l'est aussi :

$$\Pi \phi_{nlj}(\vec{r}, m_z, t) = \phi_{I=nlj}(-\vec{r}, m_z, t) = \pi \phi_{nlj}(\vec{r}, m_z, t) , \quad \pi = (-1)^l . \quad (\text{B.1})$$

Il est également à noter que, m_z étant bien défini, la z -signature de la fonction d'onde l'est aussi :

$$e^{i\pi(J_z - 1/2)} \phi_{nlj}(\vec{r}, m_z, t) = \zeta_z \phi_{nlj}(\vec{r}, m_z, t) , \quad \zeta_z = \pm 1 . \quad (\text{B.2})$$

La z -signature est égale à $+1$ si l_z est pair et $s_z = +1/2$ ou si l_z est impair et $s_z = -1/2$. La signature sera égale à -1 dans les cas contraires.

B.2 Noyau déformé axial.

La brisure de symétrie de rotation pour les noyaux à couche ouverte induit une déformation du champ Γ . Cette brisure de symétrie fait que les états propres du champ

HF ou de la matrice densité à un corps ne présentent plus des nombres quantiques (l, j) bien définis.

En revanche, la parité π est conservée comme bon nombre quantique. Cela signifie que les états propres sont combinaisons linéaires d'états correspondants à des valeurs de l de même parité.

Si le système conserve une symétrie axiale, m_z reste un bon nombre quantique et les fonctions d'ondes individuelles sont notées $\phi_{N\pi}(\vec{r}, m_z, t)$, où N est le nombre quantique principal.

Si aucun axe de symétrie ne subsiste, seule la signature est bien définie. Les états de base sont combinaisons linéaires d'états associés à plusieurs couples (l_z, s_z) correspondants à la même valeur ζ_z . Les fonctions d'onde individuelles sont alors notées sous la forme $\phi_{N\pi}(\vec{r}, \zeta_z, t)$.

B.3 Noyau en rotation.

Intéressons-nous maintenant à un noyau déformé suivant l'axe z en rotation autour de l'axe x . La rotation induit une certaine triaxialité dans le noyau qu'il est important de prendre en compte dans le traitement. D'autre part, il est plus intéressant de quantifier la projection du moment angulaire suivant l'axe de rotation afin de contrôler la vitesse angulaire. Finalement, les orbites individuelles seront caractérisées par un nombre quantique principal N , la parité π , la x-signature ζ_x et l'isospin t . Celles-ci seront donc notées $\phi_{N\pi}(\vec{r}, \zeta_x, t)$.

B.4 Base propre de \hat{s}_z .

Bien que celle-ci ne soit jamais une base propre du champ moyen à un corps ou de la matrice densité à un corps, il est intéressant de définir une base dont les états possèdent une projection du spin s_z suivant l'axe de déformation bien définie. Les autres nombres quantiques sont évidemment déterminés en fonction de la situation. Un choix assez général aux vues des paragraphes précédents consiste à caractériser les fonctions individuelles par un nombre quantique principal N , la parité π , la z-signature ζ_z , la projection du spin s_z et l'isospin t . Celles-ci seront donc notées $\varphi_{N\pi}(\vec{r}, \zeta_z, s_z, t)$. L'état propre HF $\phi_{N\pi}(\vec{r}, \zeta_z, t)$ d'un noyau déformé s'écrira alors comme une combinaison linéaire des deux états $\varphi_{N\pi}(\vec{r}, \zeta_z, s_z = +1/2, t)$ et $\varphi_{N\pi}(\vec{r}, \zeta_z, s_z = -1/2, t)$.

Cette base est adaptée à l'écriture des différentes densités intervenant dans la définition des interactions de Skyrme et de Gogny ainsi que dans les fonctionnelles de l'énergie utilisées dans les calculs auto-cohérent, et en particulier dans la fonctionnelle de Skyrme. La raison pour laquelle cette base est adaptée tient dans ses propriétés sous les opérations de renversement du temps et de rotation dans l'espace d'isospin. Étudions la transformation de renversement du temps avant de revenir à l'utilité de cette base à un corps.

B.5 Définition de l'opérateur K .

Nous désignons par \mathcal{K} la transformation de renversement du temps et par K l'opérateur qui la réalise dans l'espace de Fock. Cet opérateur est caractérisé par la transformation des opérateurs de position, d'impulsion et de spin :

$$K \vec{r} K^\dagger = \vec{r} ; K \vec{p} K^\dagger = -\vec{p} ; K \hat{s} K^\dagger = -\hat{s} . \quad (\text{B.3})$$

Cet opérateur change le signe des relations de commutation, ce qui en fait un opérateur *anti-linéaire*. Pour un système à N corps, cet opérateur prend la forme explicite [71] :

$$K = e^{-i\pi \hat{S}_y / \hbar} K_0 . \quad (\text{B.4})$$

où \hat{S}_y est la projection du spin total suivant l'axe y et K_0 est l'opérateur de conjugaison complexe attaché à la représentation $\{\vec{r}^{(i)}, \hat{s}_z^{(i)}\}$:

$$K_0 \hat{s}_x^{(i)} K_0^\dagger = \hat{s}_x^{(i)} ; K_0 \hat{s}_y^{(i)} K_0^\dagger = -\hat{s}_y^{(i)} ; K_0 \hat{s}_z^{(i)} K_0^\dagger = \hat{s}_z^{(i)} . \quad (\text{B.5})$$

Utilisant les caractéristiques de l'opérateur K , il est aisé de voir que la transformée d'une fonction d'onde individuelle $\varphi_{I=N\pi}(\vec{r}, \zeta_z, s_z, t)$ sous renversement du temps sera :

$$(K \varphi)_{N\pi}(\vec{r}, \zeta_z, s_z, t) \equiv \overline{\varphi_{N\pi}(\vec{r}, \zeta_z, s_z, t)} = 2s_z \varphi_{N\pi}^*(\vec{r}, -\zeta_z, -s_z, t) . \quad (\text{B.6})$$

B.6 Base invariante sous K .

Considérons un système décrit par un état produit $|\Phi\rangle$ invariant sous renversement du temps. Il s'agit typiquement du cas de l'état fondamental d'un noyau pair-pair. Intéressons-nous aux propriétés de l'état individuel HF correspondant $\phi_{N\pi}(\vec{r}, \zeta_z, t)$ sous renversement du temps. Connaissant la loi de transformation B.6, il est aisé de connaître son état transformé en la décomposant sur ses composantes de spin $s_z = \pm 1/2$ [210]. La transformée par renversement du temps possèdera une signature opposée à l'état de départ :

$$e^{i\pi(J_z - 1/2)} \overline{\phi_{N\pi}(\vec{r}, \zeta_z, t)} = -\zeta_z \overline{\phi_{N\pi}(\vec{r}, \zeta_z, t)} . \quad (\text{B.7})$$

Le point important réside dans le fait que lorsque la fonction produit approximant l'état à N corps du système est invariante par renversement du temps, le champ moyen HF qui en découle le sera également de telle sorte que son spectre présentera une dégénérescence de Kramers d'ordre 2 entre états renversés du temps (voir Annexe C) :

$$h |\phi_{l=N\pi\zeta_z t}\rangle = \epsilon_{l=N\pi\zeta_z t} |\phi_{l=N\pi\zeta_z t}\rangle , \quad (\text{B.8})$$

avec $\epsilon_l = \epsilon_{\bar{l}}$. Par convention, nous divisons la base en deux et notons $l = (N, \pi, \zeta_z = +1, t)$ l'état de la paire dégénérée possédant une signature positive et $\bar{l} = (N, \pi, \zeta_z = -1, t)$ celui de signature négative.

B.7 Base non-invariante sous K .

Considérons à présent un système qui brise l'invariance par renversement du temps. Il s'agit typiquement de l'état fondamental d'un noyau pair-impair à l'approximation de champ moyen et/ou d'un état rotationnel à l'approximation de cranking. Soit $|\tilde{\Phi}_n\rangle$ l'état fondamental d'un noyau pair-impair.

Comme cela sera discuté dans la section suivante, le hamiltonien à un corps HF \tilde{h} qui en découle brise l'invariance par renversement du temps de telle sorte que ses états propres, notés $\tilde{\phi}_{N\pi}(\vec{r}, \zeta_z, t)$, ne possèdent plus de bonnes propriétés sous cette transformation. Alors, les états de cette base ne se correspondent plus deux à deux par l'opérateur K et la dégénérescence de Kramers du spectre individuel est perdue :

$$\tilde{h} |\tilde{\phi}_{l=N\pi\zeta_z t}\rangle = \tilde{\epsilon}_{l=N\pi\zeta_z t} |\tilde{\phi}_{l=N\pi\zeta_z t}\rangle \quad , \quad (\text{B.9})$$

avec $\tilde{\epsilon}_l \neq \tilde{\epsilon}_{\bar{l}}$.

Annexe C

Invariance du hamiltonien sous renversement du temps.

C.1 Invariance de H .

On s'accorde généralement à dire que tout système quantique évoluant en l'absence de champ extérieur satisfait au principe de micro-réversibilité, c'est à dire que son hamiltonien commute avec l'opérateur de renversement du temps. Cela est vrai en particulier du système nucléaire dont le hamiltonien défini par l'Eq. 2.1 vérifie :

$$[H, K] = 0 \quad . \quad (C.1)$$

Cette propriété d'invariance du hamiltonien est reliée à la dégénérescence de Kramers du spectre. Si l'on considère un état propre $|\Theta_i\rangle$ de valeur propre E_i , alors l'Eq. C.1 implique que son conjugué par renversement du temps $|\Theta_i\rangle = K |\Theta_i\rangle$ est lui aussi état propre de H avec la même valeur propre. Par voie de conséquence, tout sous-espace propre de H est de dimension paire et possède une base propre orthonormée dont tous les vecteurs sont deux à deux conjugués par l'opérateur K .

C.2 Brisure de symétrie au niveau du champ moyen.

Il existe des situations où cette invariance est perdue. Tel est le cas par exemple si le hamiltonien du système est modifié par l'application d'un champ magnétique extérieur. Tel est également le cas si l'on s'intéresse à des *approximations* des vrais états propres du Hamiltonien. En principe, la symétrie brisée doit être ensuite restaurée. Par exemple, les noyaux en rotation à l'approximation de cranking ou les systèmes impairs à l'approximation de champ moyen brisent spontanément l'invariance par renversement du temps. Considérons l'état fondamental HFB d'un noyau impair. Celui-ci s'écrit dans la base canonique sous la forme :

$$|\tilde{\Phi}_n\rangle = \tilde{a}_n^\dagger \prod_{l>0 \neq n} \left(\tilde{u}_l + \tilde{v}_l \tilde{a}_l^\dagger \tilde{a}_l^\dagger \right) |0\rangle \quad , \quad (C.2)$$

qui présente une asymétrie dans le remplissage de la paire d'états (n, \bar{n}) initialement conjugués par l'opération de renversement du temps. À cause de cette asymétrie du remplissage, la fonctionnelle de l'énergie possède des termes impairs non nuls. Il en résulte par dérivation un champ moyen à un corps \tilde{h} brisant l'invariance par renversement du temps.

Cette propriété signifie que \tilde{h} ne commute pas ou n'anti-commute pas avec K . Par conséquent, ses états propres ne se correspondent plus deux à deux par K et la dégénérescence de Kramers dans le spectre individuel est levée ($\tilde{\epsilon}_i \neq \tilde{\epsilon}_{\bar{i}}$). Cette propriété de \tilde{h} influence donc directement les propriétés individuelles des nucléons, mais aussi celles du noyau dans son ensemble puisque l'énergie totale de champ moyen \mathcal{E}_n d'un noyau impair n'est pas la même selon que la brisure est ou non prise en compte dans le calcul théorique (voir section 7). Cela est également vrai pour les autres observables.

Pour finir, l'état à N corps $|\tilde{\Phi}_{\bar{n}}\rangle$ conjugué de $|\tilde{\Phi}_n\rangle$ par la transformation \mathcal{K} ne possède pas la même énergie que ce dernier à l'ordre 0 des perturbations, perdant ainsi la dégénérescence de Kramers des états à N corps. En revanche, il est intéressant de noter que l'invariance initiale du hamiltonien fait que la même énergie \mathcal{E}_n est obtenue si l'état $|\tilde{\Phi}_{\bar{n}}\rangle$ est utilisé comme fonction d'essai dans la procédure de minimisation.

Annexe D

Éléments de matrice de couplage entre états de qp.

En récrivant le hamiltonien effectif 4.1 du système dans la base de qps $\{\eta_k\}$, on détermine l'interaction résiduelle couplant le vide aux états à 4 qps [40] au premier ordre des perturbations :

$$H_{40} = \sum_{ijkl} \left[(H_{40})_{ijkl} \eta_i^\dagger \eta_j^\dagger \eta_k^\dagger \eta_l^\dagger + h.c. \right] , \quad (D.1)$$

avec

$$(H_{40})_{ijkl} = \frac{1}{4} \sum_{pqrs} \bar{v}_{pqrs} U_{pi}^* U_{qj}^* V_{sk}^* V_{rl}^* , \quad (D.2)$$

où (U, V) caractérise la transformation de Bogolyubov associée au jeu de qp $\{\eta_k\}$. Ainsi, l'élément de matrice de couplage entre l'état totalement apparié de nombre parité pair $|\Phi\rangle$ associé à cette transformation et l'état à 4 qps défini par l'Eq. 4.53 s'écrit :

$$\begin{aligned} n_3 \bar{n}_2 n_1 \bar{n} \langle \Phi | H_{40} | \Phi \rangle &= 4 \left[(H_{40})_{\bar{n} n_1 \bar{n}_2 n_3} + (H_{40})_{\bar{n}_2 n_3 \bar{n} n_1} + (H_{40})_{\bar{n} \bar{n}_2 n_3 n_1} \right. \\ &\quad \left. + (H_{40})_{n_3 n_1 \bar{n} \bar{n}_2} + (H_{40})_{\bar{n} n_3 n_1 \bar{n}_2} + (H_{40})_{n_1 \bar{n}_2 \bar{n} n_3} \right] . \end{aligned} \quad (D.3)$$

Afin d'aller plus loin, nous rappelons les propriétés suivantes des éléments de matrice antisymétrisés de l'interaction à deux corps déduites de son hermiticité et de son invariance par renversement du temps :

$$\begin{aligned} \bar{v}_{i\bar{j}\bar{k}\bar{l}} &= \bar{v}_{ijkl} , \\ \bar{v}_{i\bar{j}k\bar{l}} &= \bar{v}_{i\bar{j}\bar{k}l} , \\ \bar{v}_{ijkl} &= \bar{v}_{klij}^* . \end{aligned} \quad (D.4)$$

Nous faisons l'hypothèse simplificatrice que les éléments de matrice de \bar{v} sont réels. Nous faisons également l'hypothèse que la base canonique de l'état de nombre parité pair

totalelement apparié est la même que celle des états à 4 qps créés dessus. Cela suppose en toute rigueur que la dernière transformation de la décomposition de Bloch-Messiah associée au jeu de qp $\{\eta_k\}$ est triviale. Dans ce cas, l'élément de matrice de couplage D.3 s'écrit dans cette base canonique sous la forme :

$${}_{n_3\bar{n}_2n_1\bar{n}}\langle\Phi|H_{40}|\Phi\rangle = v_n A_{nn_1n_2n_3} + u_n B_{nn_1n_2n_3} \quad , \quad (\text{D.5})$$

avec

$$\begin{aligned} A_{nn_1n_2n_3} &= \bar{v}_{n_3n_1n_2n} v_{n_2} u_{n_3} u_{n_1} + \bar{v}_{\bar{n}n_3\bar{n}_1n_2} v_{n_3} u_{n_1} u_{n_2} - \bar{v}_{\bar{n}n_1\bar{n}_3n_2} v_{n_1} u_{n_2} u_{n_3} \\ B_{nn_1n_2n_3} &= \bar{v}_{n_3n_1n_2n} u_{n_2} v_{n_3} v_{n_1} + \bar{v}_{\bar{n}n_3\bar{n}_1n_2} u_{n_3} v_{n_1} v_{n_2} - \bar{v}_{\bar{n}n_1\bar{n}_3n_2} u_{n_1} v_{n_2} v_{n_3} \quad . \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

Transformons maintenant le hamiltonien dans la base de qps propre pour l'état de nombre parité impair correspondant à l'état fondamental du noyau impair voisin. Nous faisons l'hypothèse que la base canonique associée à cet état est identique à celle de l'état de nombre parité pair totalement apparié sur lequel il est construit. L'élément de matrice de couplage entre le fondamental impair $|\tilde{\Phi}_n\rangle$ et un état à 4 qps défini par l'Eq. 4.58, s'exprime dans la base canonique en question sous la forme :

$${}_{n_3\bar{n}_2n_1\bar{n}}\langle\tilde{\Phi}_n|\tilde{H}_{40}|\tilde{\Phi}_n\rangle = u_n A_{nn_1n_2n_3} - v_n B_{nn_1n_2n_3} \quad . \quad (\text{D.7})$$

Sachant que la qp η_n^\dagger créée dans le fondamental impair est telle que $u_n \approx v_n \approx 1/\sqrt{2}$ et que A et B sont du même ordre de grandeur au voisinage du niveau de Fermi, il résulte des Eq. D.5 et D.7 que les couplages entre les états à 0 et 4 qps n'auront pas le même comportement qualitatif dans les noyaux pair-pair et dans les noyaux pair-impair.

Annexe E

Densités et fonctionnelle de Skyrme.

E.1 Densités à un corps.

Définissons à présent la matrice densité à un corps associée à un état produit $|\Phi\rangle$ et exprimée dans le produit tensoriel de l'espace réel avec les espaces de spin et d'isospin :

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r} s_z t, \vec{r}' s'_z t') &= \frac{\langle \Phi | c^\dagger(\vec{r}' s'_z t') c(\vec{r} s_z t) | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \\ &= \sum_{IJ\zeta_z} \varphi_I^*(\vec{r}', \zeta'_z, s'_z, t') \varphi_J(\vec{r}, \zeta_z, s_z, t) \rho_{ji} \quad , \end{aligned} \quad (\text{E.1})$$

où l'opérateur de création d'une particule d'isospin t et de projection du spin s_z au point \vec{r} a été écrit en utilisant la base à un corps $\varphi_{N\pi}(\vec{r}, \zeta_z, s_z, t)$:

$$c^\dagger(\vec{r} s_z t) = \sum_{I\zeta_z} \varphi_I^*(\vec{r}, \zeta_z, s_z, t) c_{i=I\zeta_z s_z t}^\dagger \quad . \quad (\text{E.2})$$

La matrice densité E.1 peut alors être décomposée en quatre termes ayant un caractère scalaire/vectorielle et isoscalaire/isovectorielle bien défini :

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r} s_z t, \vec{r}' s'_z t') &= \frac{1}{4} \left\{ [\rho_{00}(\vec{r}, \vec{r}') \delta_{s_z s'_z} + \vec{s}_{00}(\vec{r}, \vec{r}') \cdot \vec{\sigma}_{s'_z s_z}] \delta_{tt'} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i=-1}^1 [\rho_{1i}(\vec{r}, \vec{r}') \delta_{s_z s'_z} + \vec{s}_{1i}(\vec{r}, \vec{r}') \cdot \vec{\sigma}_{s'_z s_z}] (\tau_{t't})_i \right\} \quad . \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

Cette décomposition utilise la complétude dans l'espace du spin 1/2 et de l'isospin des trois matrices de Pauli complétées de la matrice unité. Dans l'Eq. E.3, $\vec{\sigma}_{s'_z s_z}$ et $\vec{\tau}_{t't}$ sont les éléments de matrice des matrices de Pauli [71] écrites sous forme vectorielle dans l'espace de spin et d'isospin :

$$\vec{\sigma}_{s'_z s_z} = \langle s'_z | \hat{\vec{\sigma}} | s_z \rangle \quad ; \quad \vec{\tau}_{t't} = \langle t' | \hat{\vec{\tau}} | t \rangle . \quad (\text{E.4})$$

Dans ce travail, nous ne considérons aucune situation où les états individuels neutrons et protons sont mélangés (comme c'est par exemple le cas pour décrire le pairing neutron-proton, la décroissance β ou les résonances de Gamow-Teller en (Q)RPA [32]), de telle sorte que seul le terme $i = 0$ contribue dans l'Eq. E.3. Nous restreignons donc la description aux densités de matière et de spin, isoscalaires ($T = 0$) et isovectorielles ($T = 1$) suivantes :

$$\begin{aligned} \rho_0(\vec{r}, \vec{r}') &\equiv \rho_{00}(\vec{r}, \vec{r}') &= \sum_{s_z t} \rho(\vec{r}_{s_z t}, \vec{r}'_{s_z t}) \\ \rho_1(\vec{r}, \vec{r}') &\equiv \rho_{10}(\vec{r}, \vec{r}') &= \sum_{s_z t} \rho(\vec{r}_{s_z t}, \vec{r}'_{s_z t}) 2t \\ \vec{s}_0(\vec{r}, \vec{r}') &\equiv \vec{s}_{00}(\vec{r}, \vec{r}') &= \sum_{s_z s'_z t} \rho(\vec{r}_{s_z t}, \vec{r}'_{s'_z t}) \vec{\sigma}_{s'_z s_z} \\ \vec{s}_1(\vec{r}, \vec{r}') &\equiv \vec{s}_{10}(\vec{r}, \vec{r}') &= \sum_{s_z s'_z t} \rho(\vec{r}_{s_z t}, \vec{r}'_{s'_z t}) 2t \vec{\sigma}_{s'_z s_z} \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

où les grandeurs isoscalaires somment les contributions neutron et proton (ex. $\rho_0 = \rho_{1/2} + \rho_{-1/2}$) tandis que les grandeurs isovectorielles nous informent sur leurs différences (ex. $\rho_1 = \rho_{1/2} - \rho_{-1/2}$).

On peut comprendre l'intérêt d'écrire ces densités dans la base $\varphi_{N\pi}(\vec{r}, \zeta_z, s_z, t)$ en étudiant leurs propriétés sous l'opération de renversement du temps. Utilisant la transformation B.6, le lien entre les densités associées à l'état $|\Phi\rangle$ et celles associées à l'état renversé du temps $K|\Phi\rangle$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \rho_T^K(\vec{r}, \vec{r}') &= \rho_T^*(\vec{r}, \vec{r}') = \rho_T(\vec{r}', \vec{r}) \\ \vec{s}_T^K(\vec{r}, \vec{r}') &= -\vec{s}_T^*(\vec{r}, \vec{r}') = -\vec{s}_T(\vec{r}', \vec{r}) \quad , \end{aligned} \quad (\text{E.6})$$

de telle sorte que la partie locale des densités de spin est nulle pour un système invariant par renversement du temps.

E.2 Fonctionnelle de l'énergie.

En plus de la partie locale des densités définies dans l'Eq. E.5, la densité d'énergie associée à la force de Skyrme 4.69 fera usage de leurs dérivées :

$$\begin{aligned}
\vec{j}_T(\vec{r}) &= \frac{i}{2} (\vec{\nabla}' - \vec{\nabla}) \rho_T(\vec{r}, \vec{r}')|_{\vec{r}=\vec{r}'} \\
\mathcal{J}_T(\vec{r}) &= \frac{i}{2} (\vec{\nabla}' - \vec{\nabla}) \otimes \vec{s}_T(\vec{r}, \vec{r}')|_{\vec{r}=\vec{r}'} \\
\tau_T(\vec{r}) &= \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}' \rho_T(\vec{r}, \vec{r}')|_{\vec{r}=\vec{r}'} \\
\vec{T}_T(\vec{r}) &= \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}' \vec{s}_T(\vec{r}, \vec{r}')|_{\vec{r}=\vec{r}'}
\end{aligned} \tag{E.7}$$

où figurent respectivement les courants, les tenseurs de courants de spin, les densités cinétiques et les densités cinétiques de spin. Les tenseurs de courant de spin sont souvent utilisés sous une forme contractée définissant les courants spin-orbite :

$$\vec{J}_T(\vec{r}) = \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} \mathcal{J}_T^{jk}(\vec{r}) \vec{e}_i \quad . \tag{E.8}$$

D'après la loi de transformation B.6, il est possible de montrer que :

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_T^K(\vec{r}) &= \mathcal{J}_T(\vec{r}) \quad ; \quad \tau_T^K(\vec{r}) = \tau_T(\vec{r}) \\
\vec{j}_T^K(\vec{r}) &= -\vec{j}_T(\vec{r}) \quad ; \quad \vec{T}_T^K(\vec{r}) = -\vec{T}_T(\vec{r})
\end{aligned} \tag{E.9}$$

de telle sorte que \vec{s}_T , \vec{j}_T et \vec{T}_T sont nuls dans un système invariant par renversement du temps. Étant données ces propriétés de transformation E.6 et E.9 et la nécessaire invariance de la fonctionnelle de l'énergie sous les opérations de renversement du temps et de rotation dans l'espace d'isospin, seuls contribuent les produits deux à deux des ρ_T , \mathcal{J}_T et τ_T entre eux, et des \vec{s}_T , \vec{j}_T et \vec{T}_T entre eux, et cela pour chaque valeur de T . La fonctionnelle prend finalement la forme générale [211] :

$$\mathcal{E}_0 = \int \mathcal{E}^{Skyrme}(\vec{R}) d\vec{R} \quad , \tag{E.10}$$

où

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}^{Skyrme}(\vec{r}) &= \sum_{T=0,1} (\mathcal{E}_T^{pair} + \mathcal{E}_T^{impair}) \\
&= \sum_{T=0,1} C_T^\rho \rho_T^2 + C_T^s \vec{s}_T \cdot \vec{s}_T + C_T^{\Delta\rho} \rho_T \Delta\rho_T + C_T^{\Delta s} \vec{s}_T \cdot \Delta\vec{s}_T \\
&\quad + C_T^\tau (\rho_T \tau_T - \vec{j}_T \cdot \vec{j}_T) + C_T^{sT} (\vec{s}_T \cdot \vec{T}_T - \mathcal{J}_T^2) \\
&\quad + C_T^{\nabla J} (\rho_T \nabla \cdot \vec{j}_T + \vec{s}_T \cdot \nabla \times \vec{j}_T) + C_T^{\nabla s} (\nabla \cdot \vec{s}_T)^2 \quad , \tag{E.11}
\end{aligned}$$

où le lien entre les constantes de couplages des termes pairs et impairs groupés entre parenthèses est dû à l'invariance de la fonctionnelle sous transformation de jauge locale [31]. Finalement, les 16 coefficients figurant dans la précédente fonctionnelle sont reliés aux 10 paramètres de la force de Skyrme 4.69 par les relations :

$$\begin{aligned}
C_0^\rho &= \frac{3}{8}t_0 + \frac{3}{48}t_3 \rho_0^\sigma \\
C_1^\rho &= -\frac{1}{4}t_0 \left(\frac{1}{2} + x_0\right) - \frac{1}{24}t_3 \left(\frac{1}{2} + x_3\right) \rho_0^\sigma \\
C_0^s &= -\frac{1}{4}t_0 \left(\frac{1}{2} - x_0\right) - \frac{1}{24}t_3 \left(\frac{1}{2} - x_3\right) \rho_0^\sigma \\
C_1^s &= -\frac{1}{8}t_0 - \frac{1}{48}t_3 \rho_0^\sigma \\
C_0^\tau &= \frac{3}{16}t_1 + \frac{1}{4}t_2 \left(\frac{5}{4} + x_2\right) \\
C_1^\tau &= -\frac{1}{8}t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1\right) + \frac{1}{8}t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2\right) \\
C_0^{sT} &= -\frac{1}{8}t_1 \left(\frac{1}{2} - x_1\right) + \frac{1}{8}t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2\right) \\
C_1^{sT} &= -\frac{1}{16}t_1 + \frac{1}{16}t_2 \\
C_0^{\Delta\rho} &= -\frac{9}{64}t_1 + \frac{1}{16}t_2 \left(\frac{5}{4} + x_2\right) \\
C_1^{\Delta\rho} &= \frac{3}{32}t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1\right) + \frac{1}{32}t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2\right) \\
C_0^{\Delta s} &= \frac{3}{32}t_1 \left(\frac{1}{2} - x_1\right) + \frac{1}{32}t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2\right) \\
C_1^{\Delta s} &= \frac{3}{64}t_1 + \frac{1}{64}t_2 \\
C_0^{\nabla J} &= -\frac{3}{4}W_0 \\
C_1^{\nabla J} &= -\frac{1}{4}W_0 \\
C_0^{\nabla s} &= 0 \\
C_1^{\nabla s} &= 0 ,
\end{aligned} \tag{E.12}$$

où la dépendance en densité de la force n'intervient que dans l'expression des coefficients C_T^ρ et C_T^s . Les coefficients $C_T^{\nabla s}$ sont nuls du fait de l'absence de force tenseur de portée nulle dans la force de Skyrme, contrairement à la version originale [122] ou à celle utilisée dans de rares études [212, 213]. De plus, les coefficients C_0^{sT} ne sont que très rarement pris différents de zéro (voir les forces Sly5 et Sly7 par exemple [125]) du fait du coût numérique important des termes en \mathcal{J}_T^2 et de leur difficile ajustement sur des données expérimentales spécifiques (voir la Ref. [214] pour une telle tentative). Une raison avancée pour les négliger dans les noyaux sphériques est la compensation exacte de ces termes (mais pas des termes impairs associés) par la force tenseur si celle-ci était prise en compte [215]. Enfin, nous ne

considérons pas de terme spin-orbite “généralisé” tel que celui introduit dans la définition des forces SkI3, SkI4, SkO et SkO' [216].

Annexe F

Limite HFB d'appariement nul.

Soit la base canonique de l'état HFB de nombre parité pair totalement apparié. L'équation du gap s'écrit dans cette base :

$$\Delta_{l\bar{l}} = -\frac{1}{2} \sum_{k>0} \bar{v}_{l\bar{l}k\bar{k}} \frac{\Delta_{k\bar{k}}}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta_{k\bar{k}}^2}} , \quad (\text{F.1})$$

tandis que la contrainte sur le nombre de nucléons dans le système prend la forme :

$$N = 2 \sum_{k>0} v_k^2 = \sum_{k>0} \left(1 - \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta_{k\bar{k}}^2}} \right) . \quad (\text{F.2})$$

Nous allons maintenant procéder à une limite d'appariement nul en considérant un spectre à une particule $\{\epsilon_k\}$ fixe. Cela est schématiquement justifié, malgré l'auto-cohérence entre les deux canaux de l'interaction, à partir du moment où la force dans le canal p-t n'est pas modifiée. Nous traitons le cas d'un spectre doublement dégénéré $\epsilon_k = \epsilon_{\bar{k}}$ typique d'un noyau déformé. L'extension au cas d'un noyau sphérique à couche ouverte est triviale bien que plus lourde à écrire. L'intensité de l'appariement dans le système étant déterminée par les éléments de matrice $\bar{v}_{l\bar{l}k\bar{k}}$ de l'interaction dans le canal p-p, la limite d'appariement nul doit être gouvernée par eux.

Plaçons nous tout d'abord dans une première limite définie par $|\bar{v}_{l\bar{l}k\bar{k}}| \ll |\epsilon_l - \epsilon_k|$ pour tout couple (k, l) tel que $k \neq l$. Dans cette situation, l'équation du gap F.1 se découple en autant d'équations de la forme :

$$\Delta_{k\bar{k}} = -\frac{1}{2} \bar{v}_{k\bar{k}k\bar{k}} \frac{\Delta_{k\bar{k}}}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta_{k\bar{k}}^2}} , \quad (\text{F.3})$$

où seule l'auto-interaction de la paire contribue. Deux cas se présentent :

- La paire d'orbite (k, \bar{k}) est telle que $\epsilon_k = \epsilon_{\bar{k}} = \lambda$. Supposons alors qu'il existe une solution non-triviale à l'Eq. F.3 et simplifions celle-ci à gauche et à droite par $\Delta_{k\bar{k}}$.

Quelle que soit la valeur négative de l'élément de matrice $\bar{v}_{k\bar{k}k\bar{k}}$, il existe effectivement une solution non-triviale de la forme :

$$|\Delta_{k\bar{k}}| = -\frac{\bar{v}_{k\bar{k}k\bar{k}}}{2} . \quad (\text{F.4})$$

- La paire d'orbite (k, \bar{k}) est telle que $\epsilon_k = \epsilon_{\bar{k}} \neq \lambda$. S'il existe une solution non-triviale $\Delta_{k\bar{k}}$ à l'Eq. F.3, elle doit vérifier l'identité :

$$\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta_{k\bar{k}}^2} = -\frac{\bar{v}_{k\bar{k}k\bar{k}}}{2} , \quad (\text{F.5})$$

ce qui n'est possible que pour $|\bar{v}_{k\bar{k}k\bar{k}}| \geq 2|\epsilon_k - \lambda|$. Si cette inégalité n'est pas vérifiée, seule la solution triviale $\Delta_{k\bar{k}} = 0$ existe.

Plaçons nous à présent dans une limite où l'auto-interaction des paires dans le canal p-p devient infiniment faible. En raison de la dégénérescence de Kramers dans le spectre, il existe *au maximum* une paire d'orbites (n, \bar{n}) telle que $\epsilon_n = \epsilon_{\bar{n}} = \lambda$, c'est à dire ne satisfaisant pas à l'inégalité $|\bar{v}_{k\bar{k}k\bar{k}}| < 2|\epsilon_k - \lambda|$.

- 1) Lorsqu'une telle paire d'orbites existe, les occupations correspondantes vérifient nécessairement :

$$\begin{bmatrix} u_n^2 \\ v_n^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{\bar{n}}^2 \\ v_{\bar{n}}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix} . \quad (\text{F.6})$$

Toutes les autres paires sont telles que $\Delta_{k\bar{k}} = 0$ d'après le calcul précédent. Deux cas sont alors possibles pour les occupations v_k^2 .

- 2) Soit $\epsilon_k < \lambda$ et alors :

$$\begin{bmatrix} u_k^2 \\ v_k^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{\bar{k}}^2 \\ v_{\bar{k}}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} . \quad (\text{F.7})$$

- 3) Soit $\epsilon_k > \lambda$ et alors :

$$\begin{bmatrix} u_k^2 \\ v_k^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{\bar{k}}^2 \\ v_{\bar{k}}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} . \quad (\text{F.8})$$

Étant donnés ces résultats, il est aisé de constater que satisfaire à l'Eq. F.2 pour un nombre de particules moyen pair ($N = 2n - 2$) dans une telle limite, requiert de n'avoir

que des orbites appartenant aux catégories 2) et 3) précédentes. En d'autres termes, le potentiel chimique s'ajuste nécessairement dans cette limite entre deux paires de niveaux dégénérés pour assurer le nombre moyen pair de nucléons dans l'état de nombre parité pair. La fonction HFBp correspondante, définie dans la base canonique par l'Eq. 4.38, tend alors vers :

$$|\Phi^{HFBp}(N)\rangle \rightarrow |\Phi^{Hfp}(N)\rangle = \prod_{k=1}^{n-1=N/2} a_k^\dagger a_k^\dagger |0\rangle . \quad (\text{F.9})$$

Cet état limite correspond à la transformation de qps :

$$\begin{aligned} \gamma_k^\dagger &= -a_{\bar{k}} \quad \text{pour } \epsilon_k < \lambda \\ \gamma_{\bar{k}}^\dagger &= a_k \quad \text{pour } \epsilon_k < \lambda \\ \gamma_k^\dagger &= a_k^\dagger \quad \text{pour } \epsilon_k > \lambda \\ \gamma_{\bar{k}}^\dagger &= a_{\bar{k}}^\dagger \quad \text{pour } \epsilon_k > \lambda \end{aligned} \quad (\text{F.10})$$

On montre aussi aisément que satisfaire à l'Eq. F.2 pour un nombre de particules moyen impair ($N+1 = 2n-1$) requiert dans la même limite d'avoir une paire d'orbites appartenant à la catégorie 1). Le potentiel chimique s'ajuste alors sur une paire d'états (n, \bar{n}) pour assurer le nombre moyen impair de nucléons dans l'état de nombre parité pair. Dans ce cas, la fonction HFBp tend vers :

$$|\Phi^{HFBp}(N+1)\rangle \rightarrow |\Phi^{Hfp}(N+1)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + a_n^\dagger a_{\bar{n}}^\dagger\right) \prod_{k=1}^{n-1=N/2} a_k^\dagger a_k^\dagger |0\rangle . \quad (\text{F.11})$$

Cet état limite correspond à la transformation de qps F.10 excepté pour la paire d'orbites (n, \bar{n}) à laquelle sont associés les opérateurs de qps :

$$\gamma_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_n^\dagger - a_{\bar{n}}) \quad (\text{F.12})$$

$$\gamma_{\bar{n}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{\bar{n}}^\dagger + a_n) \quad , \quad (\text{F.13})$$

dont les énergies tendent d'après les Eq. 4.42¹ et F.4 vers :

$$E_n = E_{\bar{n}} = |\Delta_{n\bar{n}}| = -\frac{\bar{v}_{n\bar{n}n\bar{n}}}{2} \rightarrow 0 . \quad (\text{F.14})$$

¹Dans le cas d'une force d'appariement monopolaire telle que celle utilisées ici, les énergies de qps d'un système invariant par renversement du temps prennent la forme BCS dans la base canonique.

La limite d'appariement nul prend donc une tournure inhabituelle dans ce second cas. Cette limite met en relief le rôle particulier joué dans l'état F.11 par la paire de qps la plus basse, puisque celles-ci ne tendent ni vers un opérateur de création de particule ni vers un opérateur d'annihilation, mais restent un mélange des deux. Ainsi, la seconde transformation de la décomposition de Bloch-Messiah ne prend pas une forme triviale dans la limite d'appariement nul pour un état de nombre parité pair ayant un nombre moyen impair de particules. En d'autres termes, l'ensemble de la théorie HFB ne se réduit pas à la théorie HF dans la limite d'appariement nul.

Reprenons le même raisonnement pour un état de nombre parité impair. Faisons de nouveau l'hypothèse simplificatrice que les bases canoniques de l'état de nombre parité pair totalement apparié et de l'état de nombre parité impair construit dessus comme un état perturbatif à 1 qp sont identiques et caractérisées par le jeu d'opérateurs $\{a_k\}$. L'état à une qp prend alors la forme :

$$|\Phi_n^{HFB}(N+1)\rangle = a_n^\dagger \prod_{k \neq n > 0} \left(u_k + v_k a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger \right) |0\rangle \quad . \quad (\text{F.15})$$

Le fait d'avoir un nombre moyen impair de particules ($N+1 = 2n-1$) dans le système se traduit par la relation :

$$2n-2 = 2 \sum_{k \neq n > 0} v_k^2 = \sum_{k \neq n > 0} \left(1 - \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta_{k\bar{k}}^2}} \right) \quad . \quad (\text{F.16})$$

Dans la limite d'appariement nul, satisfaire à l'Eq. F.16 requiert que toutes les paires (k, \bar{k}) , avec $k \neq n$ vérifient les Eq. F.7 ou F.8. Par conséquent, la limite de l'état perturbatif impair à une qp F.15 sera :

$$|\Phi_n^{HFB}(N+1)\rangle \rightarrow |\Phi_n^{HF}(N+1)\rangle = a_n^\dagger \prod_{l=1}^{n-1=N/2} a_l^\dagger a_{\bar{l}}^\dagger |0\rangle \quad . \quad (\text{F.17})$$

Pour finir, nous constatons que les états $|\Phi_n^{HF}(N+1)\rangle$ et $|\Phi^{HFp}(N+1)\rangle$ sont reliés par la relation :

$$|\Phi_n^{HF}(N+1)\rangle = \gamma_n^\dagger |\Phi^{HFp}(N+1)\rangle \quad (\text{F.18})$$

où γ_n^\dagger est la qp singulière définie par l'Eq. F.13. Le déterminant de Slater impair s'écrit donc comme un état à une qp sur un état de nombre parité pair défini comme la combinaison linéaire équiprobable des déterminants de Slater pairs voisins.

Annexe G

Propriétés des éléments de matrice de $v[\rho]$ et de ses dérivées.

Plaçons-nous dans la base canonique (l, \bar{l}) de l'état de nombre parité pair $|\Phi^{HFBp}\rangle$. Celle-ci diagonalise la matrice densité associée à cet état.

Les forces phénoménologiques utilisées à ce jour dépendent de la densité locale scalaire isoscalaire $\rho_0(\vec{R})$ dans le canal p-t. Comme discuté dans la section 4.3.1, elles pourraient aussi dépendre de la densité locale scalaire isovectorielle $\rho_1(\vec{R})$, voire des densités locales vectorielles dans des versions plus élaborées. Quoi qu'il en soit, seules les dépendances scalaires, paires par renversement du temps, sont non nulles dans un état $|\Phi^{HFBp}\rangle$. Par exemple, une force de Gogny ou de Skyrme s'écrit pour un tel état sous la forme :

$$v[\rho_0(\vec{R})] = v \left[2 \sum_{L,t} |\phi_L(\vec{R}, \zeta_z = 1, t)|^2 \rho_l \right] \quad , \quad (\text{G.1})$$

où la densité locale $\rho_0(\vec{R})$ a été exprimée dans la base (l, \bar{l}) en utilisant l'égalité des valeurs propres de la matrice densité $\rho_l = \rho_{\bar{l}}$ ainsi que l'Eq. B.6. Le vecteur \vec{R} désigne le centre de masse des deux nucléons en interaction. Le terme dépendant de la densité ne modifie donc pas dans ce cas les propriétés d'invariance par renversement du temps de la force. De l'Eq. G.1, on tire pour tout couple (l, \bar{l}) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial v[\rho_0(\vec{R})]}{\partial \rho_l} &= \frac{\partial \rho_0(\vec{R})}{\partial \rho_l} \frac{\partial v[\rho_0(\vec{R})]}{\partial \rho_0(\vec{R})} \\ &= |\phi_L(\vec{R}, \zeta_z = 1, t)|^2 \frac{\partial v[\rho_0(\vec{R})]}{\partial \rho_0(\vec{R})} \\ &= \frac{\partial v[\rho_0(\vec{R})]}{\partial \rho_{\bar{l}}} \quad , \end{aligned} \quad (\text{G.2})$$

car $|\phi_L(\vec{R}, \zeta_z = 1, t)|^2 = \overline{|\phi_L(\vec{R}, \zeta_z = 1, t)|^2}$. De même :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 v [\rho_0(\vec{R})]}{\partial \rho_l \partial \rho_{\bar{l}}} &= |\phi_L(\vec{R}, \zeta_z = 1, t)|^4 \frac{\partial^2 v [\rho_0(\vec{R})]}{\partial \rho_0(\vec{R})^2} \\
&= \frac{\partial^2 v [\rho_0(\vec{R})]}{\partial \rho_{\bar{l}} \partial \rho_l} \\
&= \frac{\partial^2 v [\rho_0(\vec{R})]}{\partial \rho_l^2} .
\end{aligned} \tag{G.3}$$

Il apparaît également que toutes les dérivées successives de $v[\rho_0(\vec{R})]$ par rapport aux éléments de matrice de ρ seront invariantes par renversement du temps pour un état $|\Phi^{HFBp}\rangle$. Considérant des éléments de matrice antisymétrisés dans la base $\{|l\rangle\}$, il est donc possible d'écrire pour tout $n \geq 0$ et pour tout k-uplet (p, \dots, q) :

$$\left(\frac{\partial^n v}{\partial \rho_p \dots \partial \rho_q} \right)_{i\bar{k}j\bar{l}} = \left(\frac{\partial^n v}{\partial \rho_p \dots \partial \rho_q} \right)_{\bar{i}k\bar{j}l} . \tag{G.4}$$

L'opérateur énergie cinétique, pair sous renversement du temps, s'écrit :

$$t_i = \langle i | t | i \rangle = t_{\bar{i}} , \tag{G.5}$$

ce qui, en résumant les différents résultats ci-dessus et en utilisant les Eq 4.28, 4.32 et 4.33, entraîne l'égalité des éléments diagonaux du champ HF :

$$\epsilon_i = \langle i | h | i \rangle = \langle \bar{i} | h | \bar{i} \rangle = \epsilon_{\bar{i}} , \tag{G.6}$$

dans un état de nombre parité pair.

Annexe H

Éléments de matrice de $G^{(\beta,\alpha)}$.

La matrice de réaction $G^{(\beta,\alpha)}$ satisfait une équation auto-cohérente généralisant celle de la matrice de Bruekner usuelle G^α :

$$\begin{aligned}
 G^{(\beta,\alpha)}(W_\beta, W_\alpha) &= V + G^{(\beta,\alpha)}(W_\beta, W_\alpha) \frac{Q^\alpha}{W_\alpha - h_0^\alpha} V \\
 &+ V \frac{Q^\beta}{W_\beta - h_0^\beta} G^{(\beta,\alpha)}(W_\beta, W_\alpha) \\
 &- V \frac{Q^\beta}{W_\beta - h_0^\beta} G^{(\beta,\alpha)}(W_\beta, W_\alpha) \frac{Q^\alpha}{W_\alpha - h_0^\alpha} V .
 \end{aligned} \tag{H.1}$$

Un élément de matrice de $G^{(\beta,\alpha)}$ s'écrit explicitement sous la forme :

$$\begin{aligned}
 G_{\beta_m \beta_n \alpha_p \alpha_q}^{(\beta,\alpha)}(W_\beta, W_\alpha) &= V_{\beta_m \beta_n \alpha_p \alpha_q} \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{\epsilon_{\alpha_r}, \epsilon_{\alpha_s} > \epsilon_F^\alpha} \frac{G_{\beta_m \beta_n \alpha_r \alpha_s}^{(\beta,\alpha)}(W_\beta, W_\alpha) V_{\alpha_r \alpha_s \alpha_p \alpha_q}}{\epsilon_{\alpha_p} + \epsilon_{\alpha_q} - \epsilon_{\alpha_r} - \epsilon_{\alpha_s} - W_\alpha} \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{\epsilon_{\beta_t}, \epsilon_{\beta_u} > \epsilon_F^\beta} \frac{V_{\beta_m \beta_n \beta_t \beta_u} G_{\beta_t \beta_u \alpha_p \alpha_q}^{(\beta,\alpha)}(W_\beta, W_\alpha)}{\epsilon_{\beta_m} + \epsilon_{\beta_n} - \epsilon_{\beta_t} - \epsilon_{\beta_u} - W_\beta} \\
 &- \frac{1}{4} \sum_{\substack{\epsilon_{\beta_t}, \epsilon_{\beta_u} > \epsilon_F^\beta \\ \epsilon_{\alpha_r}, \epsilon_{\alpha_s} > \epsilon_F^\alpha}} \frac{V_{\beta_m \beta_n \beta_t \beta_u} G_{\beta_t \beta_u \alpha_r \alpha_s}^{(\beta,\alpha)}(W_\beta, W_\alpha) V_{\alpha_r \alpha_s \alpha_p \alpha_q}}{(\epsilon_{\beta_m} + \epsilon_{\beta_n} - \epsilon_{\beta_t} - \epsilon_{\beta_u} - W_\beta) (\epsilon_{\alpha_p} + \epsilon_{\alpha_q} - \epsilon_{\alpha_r} - \epsilon_{\alpha_s} - W_\alpha)} .
 \end{aligned} \tag{H.2}$$

Dans cette définition, W_α correspond à l'énergie d'excitation totale de l'état intermédiaire à N corps juste avant l'interaction $G^{(\beta,\alpha)}$ tandis que W_β correspond à celle de l'état intermédiaire à N corps juste après l'interaction $G^{(\beta,\alpha)}$.

Annexe I

Propriétés de $v_{Skymc}^{(\beta,\alpha)}$ pour la projection sur le moment angulaire.

Nous devons vérifier que l'énergie projetée 14.13 de l'état fondamental est réelle. La validité de cette propriété pour un spin $I \neq 0$, c'est à dire pour le choix f_{α}^{I0} des coefficients, se déduit automatiquement du cas $I = 0$. Du fait de l'intégration symétrique autour de 0 réalisée sur la variable α dans le calcul de l'énergie, il suffit de prouver que l'identité :

$$\mathcal{H}^*(0, \alpha) = \mathcal{H}(0, -\alpha) \quad , \quad (\text{I.1})$$

est valide lorsque le hamiltonien mixte 14.10 spécifié au cas de la projection sur I est utilisé. Cette même propriété est immédiate pour le recouvrement $\mathcal{I}(0, \alpha)$.

Intéressons-nous tout d'abord au comportement des différentes densités sous rotation. Pour cela, nous introduisons la matrice unitaire 3×3 $\mathcal{R}(\alpha)$ qui fait tourner un état propre de l'opérateur position :

$$R(\alpha) |\vec{r}\rangle \equiv |\mathcal{R}(\alpha) \vec{r}\rangle \quad , \quad (\text{I.2})$$

ou encore qui fait tourner un opérateur vectoriel tel que l'opérateur position :

$$R^\dagger(\alpha) \vec{r} R(\alpha) = \mathcal{R}(\alpha) \vec{r} \quad . \quad (\text{I.3})$$

La spécification de la densité locale mixte scalaire-isoscalaire au cas de la projection sur le moment angulaire s'écrit :

$$\rho_0^{(\beta,\alpha)}(\vec{r}) = \frac{\langle \Phi_0^0 | R^\dagger(\beta) \hat{\rho}_0(\vec{r}) R(\alpha) | \Phi_0^0 \rangle}{\langle \Phi_0^0 | R^\dagger(\beta) R(\alpha) | \Phi_0^0 \rangle} \quad . \quad (\text{I.4})$$

Cette quantité est un élément de matrice entre deux états à N corps dans lequel \vec{r} est une variable externe n'intervenant pas dans le produit scalaire. Elle constitue donc un opérateur fonction de l'opérateur position \vec{r} . En tant que tel, le comportement de $\rho_0^{(\beta,\alpha)}(\vec{r})$ sous rotation est, d'après l'Eq. I.3 :

$$R^\dagger(\alpha) \rho_0^{(\beta,\alpha)}(\vec{r}) R(\alpha) = \rho_0^{(\beta,\alpha)}(\mathcal{R}(\alpha) \vec{r}) \quad . \quad (\text{I.5})$$

En tant qu'opérateur fonction des variables position \vec{r}_i des nucléons, la transformation sous rotation de l'opérateur densité scalaire-isoscalaire est donnée par :

$$R^\dagger(\alpha) \hat{\rho}_0(\vec{r}) R(\alpha) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \mathcal{R}(\alpha) \vec{r}_i) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathcal{R}^\dagger(\alpha) \vec{r} - \vec{r}_i) = \hat{\rho}_0(\mathcal{R}^\dagger(\alpha) \vec{r}) \quad . \quad (\text{I.6})$$

D'après l'Eq. I.5 nous pouvons écrire :

$$R^\dagger(\gamma) \rho_0^{(\beta,\alpha)}(\vec{r}) = R^\dagger(\gamma) \rho_0^{(\beta,\alpha)}(\vec{r}) R(\gamma) R^\dagger(\gamma) = \rho_0^{(\beta,\alpha)}(\mathcal{R}(\gamma) \vec{r}) R(-\gamma) \quad , \quad (\text{I.7})$$

qui, grâce à la définition de la densité locale mixte et à l'Eq. I.6, se met sous la forme :

$$\begin{aligned} R^\dagger(\gamma) \rho_0^{(\beta,\alpha)}(\vec{r}) &= \frac{\langle \Phi_0^0 | R^\dagger(\beta) \hat{\rho}_0(\mathcal{R}(\gamma) \vec{r}) R(\alpha) | \Phi_0^0 \rangle}{\langle \Phi_0^0 | R^\dagger(\beta) R(\alpha) | \Phi_0^0 \rangle} R(-\gamma) \\ &= \frac{\langle \Phi_0^0 | R^\dagger(\beta) R(\gamma) \hat{\rho}_0(\vec{r}) R^\dagger(\gamma) R(\alpha) | \Phi_0^0 \rangle}{\langle \Phi_0^0 | R^\dagger(\beta) R(\gamma) R^\dagger(\gamma) R(\alpha) | \Phi_0^0 \rangle} R(-\gamma) \\ &= \rho_0^{(\beta-\gamma, \alpha-\gamma)}(\vec{r}) R(-\gamma) \quad . \end{aligned} \quad (\text{I.8})$$

Nous sommes maintenant prêts à démontrer la propriété I.1. Étant donnée l'Eq. 14.10 :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^*(0, \alpha) &= \langle \Phi_0^0 | R^\dagger(\alpha) \frac{1}{2} \left\{ H \left[(\rho_0^0(\vec{R}))^* \right] + H \left[(\rho_0^\alpha(\vec{R}))^* \right] \right\} | \Phi_0^0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0^0 | R^\dagger(\alpha) \frac{1}{2} \left\{ H \left[\rho_0^0(\vec{R}) \right] + H \left[\rho_0^\alpha(\vec{R}) \right] \right\} | \Phi_0^0 \rangle \end{aligned} \quad (\text{I.9})$$

$$\begin{aligned} &= \langle \Phi_0^0 | \frac{1}{2} \left\{ H \left[\rho_0^{-\alpha}(\vec{R}) \right] + H \left[\rho_0^0(\vec{R}) \right] \right\} R(-\alpha) | \Phi_0^0 \rangle \\ &= \mathcal{H}(0, -\alpha) \quad , \end{aligned} \quad (\text{I.10})$$

où la première identité est due au caractère réel de la densité locale scalaire-isoscalaire de champ moyen ¹, la seconde est obtenue en appliquant l'identité I.8 aux deux densités locales de champ moyen et la dernière en échangeant la position des deux hamiltoniens de champ moyen. Ce résultat finit de démontrer que la prescription dérivée dans ce travail peut être utilisée dans les calculs de projection. La vérification de ces propriétés dans le cas d'une fonction de champ moyen triaxiale ne pose pas de problème particulier.

¹Partie diagonale ($\alpha = \beta$) de $\rho_0^{(\beta,\alpha)}(\vec{r})$.

Annexe J

GCM et force à deux corps dépendant de la densité corrélée.

Afin de reproduire les effets d'une force à trois corps, nous utilisons la matrice densité corrélée contractée sur les variables de spin et d'isospin $\rho^{\Psi_k}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ dans la force à deux corps définie par l'Eq. 15.6 :

$$V_{eff}^{(3)}(\vec{r}, \vec{R}) = V^{(2)}(\vec{r}) + v(\vec{r}) \rho^{\Psi_k}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) . \quad (J.1)$$

Utilisant cette dépendance en densité, le terme de réarrangement apparaissant lors de la variation de l'énergie $\langle \Psi_k | H_{eff}^{(3)} | \Psi_k \rangle / \langle \Psi_k | \Psi_k \rangle$ par rapport à f_β^{k*} est non-nul. Cela est différent du résultat obtenu avec la densité mixte. Cette variation conduit aux équations du mouvement suivantes :

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} f_{\alpha}^k & \left[\sum_{i,j} t_{ij} \rho_{ji}^{(\beta,\alpha)} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \bar{V}_{iljk}^{(2)} \rho_{ji}^{(\beta,\alpha)} \rho_{kl}^{(\beta,\alpha)} \right. \\ & + \frac{1}{6} \sum_{i,j,k,l,m,n} v_{iln jkm} \rho_{ji}^{(\beta,\alpha)} \rho_{kl}^{(\beta,\alpha)} \sum_q f_q^k \left(\rho_{mn}^{(r,q)} \frac{\langle \Phi^\beta | \Phi^q \rangle}{\langle \Psi_k | \Psi_k \rangle} \right. \\ & \quad \left. \left. + \sum_p f_p^* \rho_{mn}^{(p,q)} \frac{\langle \Phi^p | \Phi^q \rangle}{\langle \Psi_k | \Psi_k \rangle} \right) \right] \langle \Phi^\beta | \Phi^\alpha \rangle \\ & = \mathcal{E}_k^{mel} \sum_{\alpha} f_{\alpha}^k \langle \Phi^\beta | \Phi^\alpha \rangle . \end{aligned} \quad (J.2)$$

Pour reproduire la contribution de la force à trois corps, le terme entre parenthèses dans l'Eq. J.2 doit être égal à $\rho_{mn}^{(\beta,\alpha)}$. Cela signifie que $\rho^{\Psi_k} + \partial \rho^{\Psi_k} / \partial f_\beta^{k*}$ doit être égal à $\rho^{(\beta,\alpha)}$ pour tout couple (β, α) , ce qui n'est pas vérifié en général. Ainsi, l'utilisation de la densité corrélée fait apparaître des termes superflus dans les équations du mouvement. Cela suggère de ne pas l'utiliser dans les calculs de mélange de configurations de type GCM pour renormaliser les effets d'une force à trois corps.

Annexe K

Force à trois corps et projection.

K.1 Équations du mouvement.

Les équations du mouvement correspondant à la formule 15.14 s'écrivent :

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\beta, \alpha} f_r^{k*} f_\alpha^k \left[\sum_{i,j} t_{ij} \left(\rho_{u'u}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} - \rho_{u'i}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ju}^{(\beta, \alpha)} \right) \right. \\
 & \quad + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \bar{V}_{iljk}^{(2)} \left(\rho_{u'u}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} \rho_{kl}^{(\beta, \alpha)} - \rho_{u'l}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ku}^{(\beta, \alpha)} - \rho_{u'i}^{(\beta, \alpha)} \rho_{kl}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ju}^{(\beta, \alpha)} \right) \\
 & \quad + \frac{1}{6} \sum_{i,j,k,l,m,n} \bar{V}_{ilnjk m}^{(3)} \left(\rho_{u'u}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} \rho_{kl}^{(\beta, \alpha)} \rho_{mn}^{(\beta, \alpha)} - \rho_{u'l}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ku}^{(\beta, \alpha)} \rho_{mn}^{(\beta, \alpha)} \right. \\
 & \quad \left. \left. - \rho_{u'n}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} \rho_{kl}^{(\beta, \alpha)} \rho_{mu}^{(\beta, \alpha)} - \rho_{u'i}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ju}^{(\beta, \alpha)} \rho_{kl}^{(\beta, \alpha)} \rho_{mn}^{(\beta, \alpha)} \right) \right] \langle \Phi^\beta | \Phi^\alpha \rangle \\
 & = \mathcal{E}_k^{mel} \sum_{\beta, \alpha} f_\beta^{k*} f_\alpha^k \rho_{u'u}^{(\beta, \alpha)} \langle \Phi^\beta | \Phi^\alpha \rangle \quad ,
 \end{aligned} \tag{K.1}$$

pour tout couple (u, u') .

K.2 Terme de réarrangement.

Pour un hamiltonien $H_{eff}^{(3)(\beta, \alpha)}$ dépendant de la densité, il faut modifier les équations 15.14 pour tenir compte du terme de réarrangement provenant de la variation de l'interaction par rapport aux paramètres variationnels. Elles deviennent :

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\beta, \alpha} f_\beta^{k*} f_\alpha^k \left[\langle \Phi^\beta | c_u^\dagger c_{u'} H_{eff}^{(3)(\beta, \alpha)} | \Phi^\alpha \rangle + 2 \langle \Phi^\beta | \frac{\partial V_{eff}^{(3)(\beta, \alpha)}(\vec{r}, \vec{R})}{\partial \rho^{(\beta, \alpha)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} \frac{\partial \rho^{(\beta, \alpha)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}{\partial Z_{uu'}^I} | \Phi^\alpha \rangle \right] \\
 & = \mathcal{E}_k^{mel} \langle \Psi_k | c_u^\dagger c_{u'} | \Psi_k \rangle \tag{K.2}
 \end{aligned}$$

Le terme de réarrangement requiert le calcul de :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho^{(\beta, \alpha)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}{\partial Z_{uu'}^I} &= \frac{1}{2} \left[\frac{\langle \Phi^\beta | c_u^\dagger c_{u'} \hat{\rho}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \Phi^\alpha \rangle}{\langle \Phi^\beta | \Phi^\alpha \rangle} - \frac{\langle \Phi^\beta | c_u^\dagger c_{u'} | \Phi^\alpha \rangle \langle \Phi^\beta | \hat{\rho}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \Phi^\alpha \rangle}{\langle \Phi^\beta | \Phi^\alpha \rangle^2} \right] \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \varphi_I^*(\vec{r}_2, \zeta'_z, s'_z, t') \varphi_J(\vec{r}_1, \zeta_z, s_z, t) \rho_{u'i}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ju}^{(\beta, \alpha)} . \end{aligned} \quad (\text{K.3})$$

Nous sommons maintenant la contribution provenant de la dépendance en densité de $V_{eff}^{(3)(\beta, \alpha)}$ dans le premier terme de l'Eq. K.2 et le terme de réarrangement pour aboutir à :

$$\begin{aligned} &\frac{1}{4} \sum_{\beta, \alpha} f_\beta^{k*} f_\alpha^k \sum_{i,j,k,l} \overline{\langle \varphi_i \varphi_l | v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho^{(\beta, \alpha)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \varphi_k \varphi_j \rangle} \langle \Phi^\beta | c_u^\dagger c_{u'} c_i^\dagger c_l^\dagger c_k c_j | \Phi^\alpha \rangle \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\beta, \alpha} f_\beta^{k*} f_\alpha^k \sum_{i,j,k,l} \overline{\langle \varphi_i \varphi_l | v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \frac{\partial \rho^{(\beta, \alpha)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}{\partial Z_{uu'}^I} | \varphi_k \varphi_j \rangle} \langle \Phi^\beta | c_i^\dagger c_l^\dagger c_k c_j | \Phi^\alpha \rangle \\ &= \frac{1}{6} \sum_{\beta, \alpha} f_\beta^{k*} f_\alpha^k \sum_{i,j,k,l,n,m} v_{iln jkm} \left(\rho_{u'u}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} \rho_{kl}^{(\beta, \alpha)} \rho_{mn}^{(\beta, \alpha)} - \rho_{u'l}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ku}^{(\beta, \alpha)} \rho_{mn}^{(\beta, \alpha)} \right. \\ &\quad \left. - \rho_{u'i}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ju}^{(\beta, \alpha)} \rho_{kl}^{(\beta, \alpha)} \rho_{mn}^{(\beta, \alpha)} \right) \langle \Phi^\beta | \Phi^\alpha \rangle \\ &- \frac{1}{6} \sum_{\beta, \alpha} f_\beta^{k*} f_\alpha^k \sum_{i,j,k,l,n,m} v_{iln jkm} \rho_{u'n}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} \rho_{kl}^{(\beta, \alpha)} \rho_{mu}^{(\beta, \alpha)} \langle \Phi^\beta | \Phi^\alpha \rangle \\ &= \frac{1}{6} \sum_{\beta, \alpha} f_\beta^{k*} f_\alpha^k \sum_{i,j,k,l,n,m} v_{iln jkm} \left(\rho_{u'u}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} \rho_{kl}^{(\beta, \alpha)} \rho_{mn}^{(\beta, \alpha)} - \rho_{u'l}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ku}^{(\beta, \alpha)} \rho_{mn}^{(\beta, \alpha)} \right. \\ &\quad \left. - \rho_{u'n}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ji}^{(\beta, \alpha)} \rho_{kl}^{(\beta, \alpha)} \rho_{mu}^{(\beta, \alpha)} - \rho_{u'i}^{(\beta, \alpha)} \rho_{ju}^{(\beta, \alpha)} \rho_{kl}^{(\beta, \alpha)} \rho_{mn}^{(\beta, \alpha)} \right) \langle \Phi^\beta | \Phi^\alpha \rangle . \end{aligned} \quad (\text{K.4})$$

où v est en fait de la forme $v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2, \vec{p}, \hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\tau}_1, \hat{\tau}_2)$ et où ses éléments de matrice $v_{iln jkm}$ sont définis par l'Eq. 15.9.

La comparaison avec l'Eq. K.1 montre que la même contribution formelle aux équations du mouvement que celle provenant de la force à trois corps est obtenue à condition que $v_{iln jkm}$ reproduise $\bar{V}_{iln jkm}^{(3)}$. Le terme de réarrangement joue un rôle crucial puisqu'il fournit une combinaison d'indices impossible à obtenir par la seule dépendance en densité de la force à deux corps.